N° d'Ordre : 4 (1975)
Référence CNRS : AO 11 584

THESE

présentée devant l'UNIVERSITE de NANTES
pour obtenir le grade de

DOCTEUR-INGENIEUR

par

BERNARD ESPIAU

ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE

SIMULATION ET OPTIMISATION DE PROCESSUS REPRESENTES PAR DES EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

Soutenue le 8 juillet devant la Commission d'Examen 1975

M. MEZENCEV Président

MM. SÉVELY
MALENGÉ
POINTEAU
BACHELIER
LAURGEAU
Examinateurs

N° d'Ordre : 4 (1975)
Référence CNRS : AO 11 584

THESE

présentée devant l'UNIVERSITE de NANTES
pour obtenir le grade de

DOCTEUR-INGENIEUR

par

BERNARD ESPIAU

ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE

SIMULATION ET OPTIMISATION DE PROCESSUS REPRESENTES PAR DES EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

Soutenue le 8 juillet devant la Commission d'Examen

M. MEZENCEV	Président
MM. SÉVELY MALENGÉ POINTEAU BACHELIER LAURGEAU	Examinateurs

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555012_0018

UNIVERSITE DE NANTES

Président : M. SPARFEL - Pharmacie -

Liste des enseignants des disciplines scientifiques :

Professeurs	M. BRILLOUET	Mathématiques
	M. PAUC	«
	M. PETRESCO	«
	M. RAFFIN	«
	M. PIRONNEAU (ENSM)	Mécanique
	M. RAVILLY (ENSM)	«
	M. TARDY (ENSM)	«
	M. AVIGNON	Physique
	M. BOULLOUD	«
	M. COLLET	«
	M. MINN	«
	M. MEZENCEV (ENSM)	«
	M. MOUTON	«
	Melle OFFRE" (ENSM)	«
	M. DUNOYER	Chimie
	M. GRAFF	«
	M. MARTIN	«
	M. PIERI	«
	M. QUINIOU	«
	M. ROUXEL	«
	M. WOJTKOWIAK	«
	M. GARRIGUES	Biologie
	Mme LE DOUARIN	«
	M. LE DOUARIN	«
	M. SELLIER	«
	M. CAVET	Sciences de la Terre
	M. FORESTIER	«
Professeurs associés	M. BRARD (ENSM)	Mécanique
Professeurs sans chaire	M. FOUQUES	Mathématiques
	M. IBISCH	«
	M. LEBORGNE	«

Professeurs sans chaire	M. BARDON	Physique
	M. CAILLER (IUT Nantes)	«
	M. GOUREAUX	«
	M. LASKAR	«
	M. LE NAOUR	«
	M. ROSIER	«
	M. BOUCHY (IUT Nantes)	Chimie
	M. CHABANEL	«
	M. GOBIN (ENSM)	«
	M. POINTEAU (ENSM)	«
	M. TOURNOUX	«
	M. DUPONT	Biologie
	M. SAUDRAY	«
	M. OTTMANN	Sciences de la Terre
Maîtres de Conférences	M. DHOMBRES	Mathématiques
	M. DO (ENSM)	«
	M. GAPAILLARD	«
	M. GATESOUPE	«
	M. LAMEAU (ENSM)	«
	M. PHAN-THE-LAI (Chargé d'Enseignement)	«
	M. VOGEL	«
	M. DUBIGEON (Chargé d'Enseignement IUT)	Mécanique
	M. GUEVEL (ENSM)	«
	M. SULMONT (ENSM)	«
	M. VAUSSY (ENSM)	«
	M. VILAINE (ENSM)	«
	M. LE BIHAN	Physique
	M. LE CORRE (ENSM)	«
	M. LE MAITRE	«
	M. LONCKE	«
	M. THOMAS (IUT Nantes)	«
	M. LE MAITRE (ENSM)	Chimie
	Mme MARTIN	«
	M. AMOURIQ	Biologie
	M. LEBRUN	«
	Mme NICOLAS-PRATT	«
	M. NICOLAS	Sciences de la Terre

Secrétaire Général : M. LERAY

Ce travail a été réalisé au Laboratoire d'Automatique de l'E.N.S.M. de Nantes, dans le cadre d'un contrat de Recherches entre la Société ANTAR et l'E.N.S.M.

Tout d'abord, je remercie vivement Monsieur le Professeur MEZENCEV pour l'intérêt qu'il a porté à mes travaux.

Je tiens également à remercier chaleureusement Monsieur LAURGEAU, Responsable du Groupe "Informatique Chimique", qui m'a permis de mener à bien cette étude grâce à ses encouragements et à ses nombreux conseils.

Monsieur le Professeur POINTEAU a bien voulu suivre avec intérêt le déroulement de mon travail et je l'en remercie.

Monsieur SEVELY, Professeur à l'Université Paul Sabatier à Toulouse, et Monsieur MALENGE, Professeur à l'Université de Nice ont bien voulu accepter d'examiner et de juger cette thèse, et je leur en suis vivement reconnaissant.

J'adresse mes remerciements au Service Recherche et Développement de la Raffinerie ANTAR-Donges, et, en particulier, à Monsieur BACHELIER, pour sa collaboration et l'attention qu'il a accordée à mes travaux.

Je remercie également tous mes collègues pour leur aide et leurs conseils, ainsi que le personnel de la dactylographie qui a bien voulu effectuer la mise en page de ce travail.

THEORIE GENERALE DE LA MODELISATION...

dessin d'André LEVAVASSEUR

extrait de la revue ANDES (mars 1975)

S O M M A I R E

Pages

INTRODUCTION 1

PREMIERE PARTIE - ANALYSE ET MODELISATION DU PROCESSUS - 5

I.I - CAS SIMPLE D'UN ECHANGEUR THERMIQUE 5

I.II - CAS D'UN REACTEUR CATALYTIQUE 9

I.II.1 - Bilan matière 10

I.II.2 - Bilan enthalpique 11

I.II.3 - Expression du modèle en termes d'avancement de réaction 11

I.II.4 - Conditions aux limites 13

I.II.5 - Passage en modèle adimensionnel 14

I.II.6 - Remarques - Conclusion 17

DEUXIEME PARTIE - METHODES DE SIMULATION D'UN ECHANGEUR THERMIQUE - 21

II.I - DESCRIPTION DES PROCESSUS PILOTES 21

II.I.1 - Pseudo pilote de laboratoire 21

II.I.2 - Pilote semi-industriel de reforming catalytique 21

II.II - RESOLUTION ANALYTIQUE 21

II.III - SIMULATION 25

II.III.1 - Discrétisation 25

II.III.2 - Approximation polynômiale 26

II.III.3 - Approximation polynômiale de degré quelconque 29

II.IV - EXAMEN DES RESULTATS - COMPARAISON DES METHODES DE SIMULATION 40

TROISIEME PARTIE - SIMULATION NUMERIQUE D'UN REACTEUR TUBULAIRE A STOECHIOMETRIE UNIQUE - 53

III.I - PROCEDURE DE TRANSFORMATION INTEGRALE 53

III.I.1 - Choix et justification des opérateurs intégraux 57

III.I.2 - Action des opérateurs sur le terme de création masse-énergie 65

III.I.3 - Recherche des fonctions de Green 71

III.II - TRAITEMENT NUMERIQUE 76

III.II.1 - Synthèse des principales étapes de l'algorithme 76

III.II.2 - Remarques sur certains problèmes numériques apparus lors de la simulation 79

III.III - RESULTATS 82

QUATRIEME PARTIE - PROBLEMES DE COMMANDE OPTIMALE - 95

IV.I - POSITION DU PROBLEME ET METHODE GENERALE 95

IV.II - TRAITEMENT THEORIQUE D'UN MODELE COMPLEXE 102

IV.III - EXEMPLE SIMPLE 117

CONCLUSION 127

ANNEXES - I.A - CHOIX DES CONDITIONS AUX LIMITES 129

I.B - NOTATION DES MECANISMES REACTIONNELS 133

I.C - REMARQUES SUR LA LOI DE VITESSE 135

I.D - RAPPELS DE CONDUCTION ET DE DIFFUSION 141

II - RAPPELS SUR LES POLYNÔMES DE CHEBYSHEV 145

III.A - RAPPELS SUR LES FONCTIONS DE GREEN 147

III.B - CALCULS DES FONCTIONS DE GREEN 151

III.C - PROCEDURE PRATIQUE DE DETERMINATION DES VALEURS PROPRES 155

IV - ASPECT NUMERIQUE DU PROBLEME D'OPTIMISATION DES SYSTEMES DYNAMIQUES PAR LE PRINCIPE DU MAXIMUM 157

BIBLIOGRAPHIE 165

INTRODUCTION

La modélisation mathématique des réacteurs chimiques, à partir d'un certain nombre de lois fondamentales, conduit généralement à des modèles de connaissance assez complexes. Selon les hypothèses retenues lors de l'établissement des bilans massique et enthalpique, on obtient des systèmes d'équations différentielles, ou aux dérivées partielles, souvent quasi-linéaires et couplées. Les possibilités offertes par l'Informatique ont redonné de l'intérêt à des modèles qui, auparavant, ne pouvaient pas être utilisés pratiquement. Plus récemment, les méthodes modernes d'optimisation des systèmes dynamiques (Principe du maximum, Programmation Dynamique, etc...) développées pour la recherche spatiale, ont été appliquées à des processus chimiques (|4||18||20||21||29|).

Outre les systèmes représentés par des équations différentielles ordinaires, largement étudiés dans la littérature |4||15||6|, certains thèmes importants faisant actuellement l'objet de recherches, sont : |30|

- La recherche des mécanismes réactionnels et l'établissements de modèles cinétiques complexes.
- La simulation des processus régis par des équations aux dérivées partielles.
- L'optimisation de ces mêmes processus.
- L'étude de la dynamique et de la stabilité de ces systèmes.

Le premier thème cité suppose un environnement matériel et intellectuel spécifiquement chimique ; en France, ces travaux sont notamment développés au Centre Cinétique de Nancy, à l'Institut de Catalyse de Lyon, à l'Institut Français du Pétrole. Le dernier domaine, qui relève plutôt de la recherche mathématique, est abordé, entre autres, à l'IRIA. L'institut de Catalyse de NOVOSIBIRSK, en U.R.S.S., qui nous a accueilli à deux reprises aucours de ce travail rassemble et étudie les quatre secteurs, tant du point de vue théorique qu'appliqué.

Notre contribution a porté essentiellement sur la simulation et l'optimisation des systèmes régis par des équations aux dérivées partielles. Par ailleurs, ce travail ayant été effectué dans le cadre d'un contrat Université-Industrie avec la Raffinerie ANTAR P.A. de Donges, les supports expérimentaux sont issus de la pétrochimie. C'est ainsi que l'ensemble de l'étude porte sur deux processus : un échangeur de chaleur de type tubulaire, et un réacteur chimique catalytique à lit fixe, cylindrique.

L'exposé sera divisé en quatre parties :

Le premier chapitre concerne la modélisation de l'échangeur et du réacteur, et l'obtention des modèles mathématiques adimensionnels. Cette "Initialisation" logique du travail qui pourrait paraître superflue à un spécialiste du Génie Chimique, nous a semblé nécessaire à l'unité de l'exposé ; les divers rappels de physico-chimie, indispensables à la compréhension, sont rassemblés dans les annexes, et précisent les concepts et la terminologie que nous avons utilisés.

Habituellement, une fois choisi un modèle de connaissance ou de représentation, l'identification des paramètres du modèle fait l'objet de la phase suivante. Toutefois, malgré la complexité d'un des modèles, nous avons utilisé des valeurs numériques de la littérature, ou des paramètres calculés, et, le cas échéant, adaptés aux résultats expérimentaux. La seconde partie traite donc uniquement de la simulation de l'échangeur de chaleur, par diverses méthodes, de difficulté croissante. Après avoir examiné la solution analytique rigoureuse, une méthode de différences finies et une approximation cubique, une procédure de collocation orthogonale, utilisant de façon originale les polynômes de Chebyshev, est développée et mise en oeuvre numériquement.

Le troisième chapitre aborde le problème plus général de la simulation d'un réacteur chimique, sur modèle bidimensionnel, avec conduction et diffusion, axiales et radiales. Une procédure de transformation intégrale est proposée et justifié en détail. Certains points précis font l'objet d'apports originaux, notamment, le calcul général récurrent des intégrales résultant de la transformation des non-linéarités, la prise en considération des réactions réversibles, la procédure itérative de convergence, adaptative et sans contraintes.

La dernière partie concerne la recherche d'un profil thermique optimal à la paroi. Le problème résultant de la formulation en modèle de connaissance est un cas d'optimisation frontière, où la grandeur de commande apparaît dans l'une des conditions aux limites, et non dans le modèle lui-même. La procédure de transformation intégrale décrite au Chapitre III nous permet de présenter le modèle sous une forme différentielle habituelle, où la commande apparaît explicitement dans les équations d'état. L'optimisation est alors effectuée de manière classique à l'aide du principe du maximum, après, cependant, écriture du critère selon les grandeurs transformées. Cette méthode a été appliquée numériquement avec succèe au cas de l'échangeur. Ainsi, malgré la complexité de l'algorithme proposé, nous pensons que cette approche constitue une contribution originale à l'étude des commandes "frontières" sur les équations aux dérivées partielles.

Remarque

Les équations seront répertoriées de la manière suivante :

- 1er chiffre = numéro de la partie (ou chapitre) considérée (de I à IV)
- 2ème chiffre = numéro du paragraphe
- 3ème chiffre = numéro du sous-paragraphe
- 4ème chiffre = numéro d'ordre (= 1,2...9, puis A,B...Z)

PREMIERE PARTIE

ANALYSE ET MODELISATION DU PROCESSUS

Tout problème de simulation, et à plus forte raison de commande, nécessite l'établissement d'un modèle du processus considéré. Dans le cas particulier des processus chimiques, les modèles du type "boîte noire" ne prétendant pas être représentatifs des systèmes complexes, il importe donc d'utiliser des modèles de connaissance. La mise au point de ces derniers demande :

- une bonne connaissance de l'ensemble des lois physiques pouvant intervenir dans le système ;
- un choix judicieux des hypothèses de travail permettant de ne faire intervenir que des facteurs essentiels à la mise en équations ;
- une recherche théorique des paramètres physiques du système, suivie d'un ajustement de ces derniers aux conditions expérimentales, par utilisation de méthodes d'identification dans la plupart des cas.

Dans cette première partie, nous détaillerons successivement deux cas :

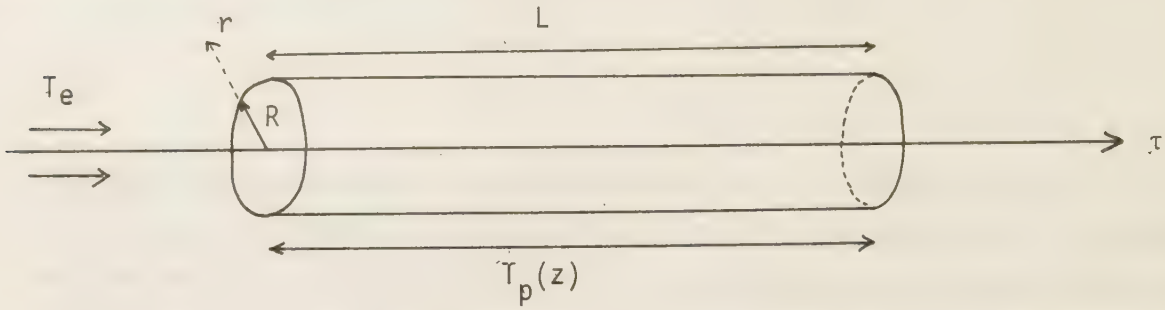
- l'étude, très simple, d'un réchauffeur tubulaire,
- la mise en équation générale d'un réacteur cylindrique.

Remarque : Les notions fondamentales de chimie physique (stoechiométrie - conduction - diffusion - cinétique) nécessaires à l'élaboration du modèle sont rappelées brièvement dans les annexes I_B, I_C et I_D.

I.I - CAS SIMPLE D'UN ECHANGEUR THERMIQUE

Il pourrait paraître superflu d'entrer dans les détails de mise en équation dans le cas d'un processus aussi simple. Cependant, les méthodes utilisées plus loin n'étant pas spécifiques des systèmes chimiques, il nous a semblé opportun d'aborder le problème à son tout début de façon à former un ensemble homogène, et à éviter de travailler sur des équations non justifiées.

Le processus considéré est un tube de longueur L, de rayon intérieur R, chauffé sur la paroi, dans lequel pénètre un fluide à la température T_E :



Les hypothèses de modélisation sont les suivantes :

* Pas de réaction chimique dans le tube
* Ecoulement à vitesse uniforme
* La conduction axiale est négligée devant le transfert thermique résultant du transport de matière
* La conductivité thermique effective du fluide est constante
* La chaleur molaire du fluide est constante dans la plage de température considérée
* Le problème possède une symétrie axiale
* L'étude est faite en régime permanent.

Les notations adoptées sont :

K_e = conductivité thermique effective du fluide

C_p = chaleur molaire du fluide

v = vitesse linéaire du flux

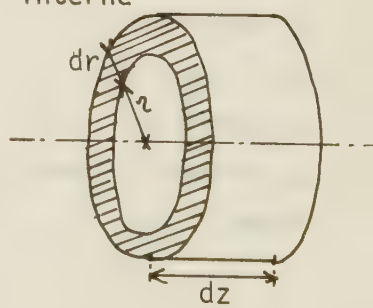
V_m = volume molaire moyen dans les conditions de l'expérience

$T(r,z)$ = température en un point du rayon (r) et de l'axe (z)

$h(T)$ = enthalpie molaire du fluide à la température T

h_w = coefficient de transfert thermique à la paroi interne

Soit l'élément de volume dV ci-contre :



Etudions les transferts thermiques dans ce petit élément de volume.

Relation de conservation de l'énergie thermique |13| |9| |19|

dQ_1 = quantité de chaleur pénétrant axialement par transfert de matière (Q_1 comptée au sens algébrique)

dQ_2 = quantité de chaleur au sens algébrique pénétrant par conduction radiale

$$dQ_1 = \frac{2\Pi r\ dr\ v}{V_m} h(T_z) - \frac{2\Pi r\ dr\ v}{V_m} h(T_{z+dz})$$

$$dQ_2 = -\ 2\Pi\ dz\ (r\ \vec{J}\ \vec{n})_r - 2\Pi\ dz\ (r\ \vec{J}\ \vec{n})_{r+dr}$$

$$dQ_2 = -\ 2\Pi r\ dz\ K_e \left.\frac{dT}{dr}\right|_r + 2\Pi(r+dr)dz\ K_e \left.\frac{dT}{dr}\right|_{r+dr} = 2\Pi K_e dz \left| \left(r\ \frac{dT}{dr}\right)_{r+dr} - r\ \frac{dT}{dr} \right|$$

Traduisons $dQ_1 + dQ_2 = 0$

$$\frac{2\Pi r\ v\ dr}{V_m} \left[h(T_z) - h(T_{z+dz})\right] + 2\Pi\ K_e\ dz \left[\left(r\ \frac{dT}{dr}\right)_{r+dr} - r\ \frac{dT}{dr}\right] = 0$$

Divisons par $2\Pi\ dr\ dz \neq 0$

$$-\ \frac{rv}{V_m} \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z} + K_e \frac{\partial}{\partial r} \left(r\ \frac{\partial T}{\partial r}\right) = 0 \qquad \text{avec} \quad C_p = \frac{\partial h}{\partial T}$$

$$-\ \frac{v\ C_p}{K_e V_m} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

$$\alpha \left| \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right| = \frac{\partial T}{\partial z} \qquad \text{avec} \quad \alpha = \frac{K_e V_m}{v\ C_p}$$

avec les conditions aux frontières :

$$\begin{cases} z = 0 : T = T_e \quad \forall r \text{ (entrée du tube)} \\ r = R : T = T_p(z)\ \forall z \neq 0 \quad \text{ou} \quad -\ \dfrac{\partial T}{\partial r} = \dfrac{h_w}{K_e} (T - T_p(z)) \\ r = 0 : \dfrac{\partial T}{\partial r} = 0 \text{ (symétrie axiale)} \end{cases}$$

(si l'on tient compte du transfert à la paroi)

Soit le modèle mathématique :

$$\left.\begin{cases} \alpha \left[\dfrac{1}{r} \dfrac{\partial T}{\partial r} + \dfrac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right] = \dfrac{\partial T}{\partial z} \quad \text{avec} \quad \alpha = \dfrac{K_e V_m}{v\ C_p} \\ z = 0 : T = T_e\ \forall r \\ r = R : T = T_p\ \forall z \neq 0 \quad \text{ou} \quad -\ \dfrac{\partial T}{\partial r} = \dfrac{h_w}{K_e} (T - T_p) \\ r = 0 : \dfrac{\partial T}{\partial r} = 0 \end{cases}\right\} \text{Système I(1)}$$

Effectuons un premier changement de variable pour éliminer le paramètre α :

Posons $\begin{cases} r = \rho R \\ z = \dfrac{R^2}{\alpha}\tau \end{cases}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial T}{\partial r} = \dfrac{1}{R}\dfrac{\partial T}{\partial \rho} \\ \dfrac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \dfrac{1}{R^2}\dfrac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} \\ \dfrac{\partial T}{\partial z} = \dfrac{\alpha}{R^2}\dfrac{\partial T}{\partial \tau} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right) + \frac{\partial^2 T}{\partial \rho^2} = \frac{\partial T}{\partial \tau}$$

Système, I(2) avec $\begin{cases} \tau = 0 : T = T_e \ \forall \rho \\ \rho = 1 : T = T_p \ \forall \tau \neq 0 \quad \text{ou} \quad -\dfrac{\partial T}{\partial \rho} = \dfrac{h_w R}{K_e}(T - T_p) \\ \rho = 0 : \dfrac{\partial T}{\partial \rho} = 0 \end{cases}$

Posons enfin :

$\theta = \dfrac{T_p - T}{\Delta T}$, dans le cas où $T_p(z) = \text{cte}$, avec $\Delta T = T_p - T_e$

Le modèle devient :

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial \theta}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \rho^2} = \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \qquad (1111)$$

avec :

Système I(3)

$$\begin{cases} \tau = 0 : \theta = 1 & (1112) \\ \rho = 1 : \theta = 0 \quad (1113) \quad \text{ou} \quad -\dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = \dfrac{h_w R}{K_e}\theta & (1114) \\ \rho = 0 : \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0 & (1115) \end{cases}$$

Nous obtenons ainsi un modèle adimensionnel aux dérivées partielles, du premier ordre selon la variable axiale (avec une condition initiale), et du deuxième ordre selon la variable radiale, avec conditions aux limites aux deux bouts.

I.II - CAS D'UN REACTEUR CATALYTIQUE

Nous envisagerons maintenant la mise en équations générale d'un réacteur cylindrique, avec les hypothèses suivantes :

- Etude en régime permanent
- Profil de vitesse "plan" et uniforme selon l'axe
- Pression constante
- Symétrie axiale du système
- Présence de N produits, liés par R réactions chimiques

De plus, il sera tenu compte de la diffusion et de la conduction selon les deux coordonnées ; les paramètres thermodynamiques et cinétiques du système seront considérés comme constants dans les conditions de l'expérience.

Précisons les notations que nous utiliserons :

Q = débit volumique

v = vitesse linéaire du fluide

C_j = concentration volumique de l'espèce j

D_z, D_r = coefficients de diffusion, axiale et radiale

r^i = vitesse de la réaction i = $\frac{1}{\alpha_{ij}} \frac{dC_j}{dt}$

h_j = enthalpie molaire de l'espèce j

K_z, K_r = coefficients de conductibilité thermique effective, axiale et radiale

$C_p = \sum_{j=1}^{n} C_j \, C_{pj} = \rho \, \hat{c}_p$ = chaleur molaire moyenne

h_p = coefficient de transfert thermique à la paroi

$T_p(z)$ = température de la paroi

T_e = température d'entrée du fluide

$\hat{c}_p$ = chaleur massique moyenne du mélange

Bi = nombre de Biot = $\frac{h_p R_R}{K_r}$

ρ = masse volumique

R_R = rayon du réacteur

L = longueur du réacteur

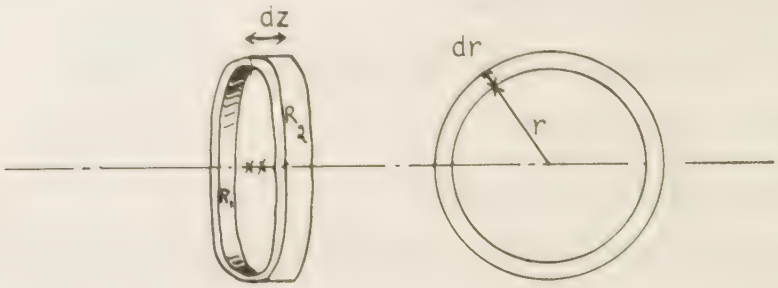
R = Nombre de réactions

N = Nombre de produits

α_{ij} = coefficients stoechiométriques

I.II.1 - Bilan matière |14| |6| |9|

Nous raisonnerons sur le bilan matière de l'espèce j, au sein d'un volume élémentaire dV, défini ainsi :



Définissons quatre termes matériels :

(1) Le flux molaire de j entrant dans dV par déplacement piston :

$$F_p = 2\pi r\ dr\ \left[(vC_j)_z - (vC_j)_{z+dz}\right]$$

(2) Le flux molaire de j entrant dans dV par diffusion axiale :

$$F_{D_z} = 2\pi r\ dr\ D_z \left[\left(\frac{\partial C_j}{\partial z}\right)_{z+dz} - \left(\frac{\partial C_j}{\partial z}\right)_z\right]$$

(Loi de Fick)

(3) Le flux molaire de j entrant dans dV par diffusion radiale :
(sur les faces R_1 et R_2)

$$F_{D_r} = 2\pi\ D_r\ dz \left[\left(r\ \frac{\partial C_j}{\partial r}\right)_{r+dr} - \left(r\ \frac{\partial C_j}{\partial r}\right)_r\right]$$

(4) Le terme de création, résultant des réactions chimiques, c'est-à-dire le nombre de moles de j créés dans dV :

$$F_c = 2\pi r\ dr\ dz \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\ r^i$$

Nous sommes en régime permanent. Le bilan matière est donc nul et s'écrit :

$$-\frac{\partial}{\partial z}\left[v\ C_j\right] + D_z \frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} + \frac{D_r}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\ \frac{\partial C_j}{\partial r}\right) + \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\ r^i = 0$$

$$\forall j = 1,2 \ldots N \qquad (1211)$$

I.II.2 - Bilan enthalpique |14||6||9|

L'énergie calorifique pénètre dans l'élément de volume dV par transport et par conduction, axiale et radiale.

Définissons cette fois trois termes seulement, car la création d'énergie est implicitement décrite dans la variation des C_j |9|.

(1) La quantité de chaleur qui pénètre par transport dans dV s'écrit :

$$dQ_T = 2\pi r\, dr \sum_{j=1}^{N} \left[(v\, C_j\, h_j)_z - (v\, C_j\, h_j)_{z+dz}\right]$$

(2) La quantité de chaleur qui pénètre dans dV par conduction axiale vaut :

$$dQ_{C_z} = 2\pi r\, dr \left[(K_z \frac{\partial T}{\partial z})_{z+dz} - (K_z \frac{\partial T}{\partial z})_z\right]$$

(3) La quantité de chaleur qui pénètre dans dV par conduction radiale est :

$$dQ_{C_r} = 2\pi\, K_r\, dz \left[(r \frac{\partial T}{\partial r})_{r+dr} - (r \frac{\partial T}{\partial r})_r\right]$$

Le bilan énergétique s'écrit donc :

$$\underbrace{- \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial z} \left[v\, C_j\, h_j\right]}_{A} + K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + K_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial T}{\partial r}) = 0$$

Le terme A peut s'écrire, si l'on suppose la vitesse axiale v constante :

$$A = - v \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial z} (C_j\, h_j) = - v \sum_{j=1}^{N} (C_j \frac{\partial h_j}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z} + h_j \frac{\partial C_j}{\partial z})$$

$$A = - v \sum_{j=1}^{n} (C_j\, C_{pj} \frac{\partial T}{\partial z} + h_j \frac{\alpha_{ij}\, r^i}{v}) \quad (\text{sachant que } v = \frac{\partial z}{\partial t})$$

en posant $C_p = \sum_{j=1}^{n} C_j\, C_{pj}$, et en rappelant que : $\Delta H_i = \sum_{j=1}^{N} \alpha_{ij}\, h_j$, l'équation de conservation énergétique devient :

$$- v\, C_p \frac{\partial T}{\partial z} - r^i\, \Delta H_i + K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + K_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial T}{\partial r}) = 0$$

I.II.3 - Expression du modèle en terme d'avancement de réaction |9|

Nous allons substituer aux (N+1) équations aux dérivées partielles (R+1) équations aux dérivées partielles en utilisant l'hypothèse de modèle stoechiométrique minimal. Rappelons que R est très inférieur à N le plus souvent (R = nombre de réactions linéairement indépendantes - N nombre d'espèces chimiques du système).

$$\text{Soit } C_j = C_j^\circ + \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\, \xi^i$$

$$\frac{\partial C_j}{\partial z} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{\partial \xi^i}{\partial z}$$

$$\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial C_j}{\partial r}\right) = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right)$$

En substituant ces 3 dernières relations dans l'équation (12-1), nous obtenons :

$$\left(-\frac{v}{Q}\right) \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{\partial \xi^i}{\partial z} + \left(\frac{D_z}{Q}\right) \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + \frac{D_r}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\, {}^{i} = 0$$

$$\forall_j = 1, N$$

$$\sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij} \left[-\frac{v}{Q} \frac{\partial \xi^i}{\partial z} + \frac{D_z}{Q} \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + \frac{D_r}{Q} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + r^i\right] = 0 \qquad \forall_j = 1, N$$

Ce système d'équations peut s'exprimer sous la forme générale :

$$A\, \underline{X} = \underline{0}$$

où la composante x_i du vecteur $\underline{X}$ vaut :

$$x_i = -\frac{v}{Q} \frac{\partial \xi^i}{\partial z} + \frac{D_z}{Q} \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + \frac{D_r}{Q} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + r^i$$

et où A est la transposée de la matrice des coefficients stoechiométriques.

Le modèle stoechiométrique étant minimal, on peut extraire de A une matrice R × R régulière. Le système étant homogène, nous devons écrire :

$$-v \frac{\partial \xi^i}{\partial z} + D_z \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + D_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + \Omega r^i = 0$$

$\forall$ i = 1, 2 ... R (correspondant aux R réactions indépendantes)

A ce stade, le modèle obtenu ne comporte plus que (R+1) équations aux dérivées partielles, accompagnées de N équations algébriques :

$$\begin{cases} -v\dfrac{\partial \xi^i}{\partial z} + D_z \dfrac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + D_r \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\dfrac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + Q\, r^i = 0 & (1231) \\ \qquad\qquad \forall i = 1,2 \ldots R & \\ -v\, C_p \dfrac{\partial T}{\partial z} - r^i \Delta \tilde{H}_i + K_z \dfrac{\partial^2 T}{\partial z^2} + K_r \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\dfrac{\partial T}{\partial r}\right) = 0 & (1232) \\ C_j = C_j^\circ + \dfrac{1}{Q}\sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\, \xi^i \qquad \forall j = 1, 2 \ldots N & (1233) \end{cases}$$

I.II.4 - Conditions aux limites |14| |28|

Nous renverrons le lecteur à l'annexe Ia en ce qui concerne la forme et la justification de certaines de ces conditions ; dans ces lignes, nous nous contenterons de les présenter.

Nous devons adjoindre au système précédent 4(R+1) conditions pour pouvoir intégrer les équations. Les relations suivantes sont immédiates et classiques :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_j}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = 0 \quad \Rightarrow \quad \dfrac{\partial \xi^i}{\partial r} = 0 \qquad \forall\, i = 1,2,\ldots R \text{ pour } r=0 \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (1241) \\ \dfrac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = 0 \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (1242) \end{cases}$$

(Les deux conditions précédentes proviennent directement de l'hypothèse de symétrie axiale)

$$\begin{cases} -K_r \dfrac{\partial T}{\partial r} = h_p\,(T-T_p) \text{ pour } r = R_R & (1243) \\ -K_z \dfrac{\partial T}{\partial z} = v\,\rho\,\hat{c}_p(T_e-T) \quad \text{pour } z = 0 & (1244) \end{cases}$$

La conservation du flux thermique, lors d'une discontinuité de mécanisme de transfert du type conduction-convection, justifie les deux équations (1243) (1244).

(Remarquons qu'il existe une relation liant $\hat{c}_p$ et C_p :

$$\hat{c}_p = \frac{\sum_j m_j\, c_{pj}}{\sum_j m_j} = \frac{\sum_j (M_j C_j V) c_{pj}}{\sum_j m_j} = \frac{\sum_j C_j\, C_{pj}}{\rho} = \frac{C_p}{\rho}$$

où M_j, c_{pj}, C_{pj}, sont respectivement la masse molaire, la chaleur massique, et la chaleur molaire du constituant j)

Les autres conditions aux limites nécessitent des hypothèses particulières sur les frontières ; nous avons adopté les relations en usage dans la littérature :

$$\frac{\partial C_j}{\partial z} = 0 \quad \text{pour} \quad z = L \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \xi^i}{\partial z} = 0 \quad \text{pour} \quad z = L \quad \forall i = 1,2,\ldots R \qquad (1245)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{pour} \quad z = L \qquad (1246)$$

$$\frac{\partial C_j}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R_R \Rightarrow \frac{\partial \xi^i}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R_R \quad \forall i = 1,2,\ldots R \qquad (1247)$$

$$-D_z \frac{\partial C_j}{\partial z} = v\,(C_j^\circ - C_j) \text{ pour } z = 0 \quad \Rightarrow \quad -D_z \frac{\partial \xi^i}{\partial z} = -v\,\xi^i \quad \text{pour } z = 0 \qquad (1248)$$

$$\forall j=1,2,..N \qquad\qquad \forall i=1,2,..R$$

Rassemblons maintenant l'ensemble des équations formant le modèle complet du réacteur à stoechiométrie multiple, sous les hypothèses précisées au début du paragraphe II :

$$-v \frac{\partial \xi^i}{\partial z} + D_z \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} + D_r \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) + Q\, r^i = 0 \qquad \forall i = 1,R \qquad (1231)$$

$$-v\, C_p \frac{\partial T}{\partial z} - r^i\, \Delta Hi + K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + K_r \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial T}{\partial r}\right) = 0 \qquad (1232)$$

$$C_j = C_j^\circ + \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\, \xi^i \qquad \forall j = 1,N \qquad (1233)$$

$$\frac{\partial \xi^i}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = 0 \quad \forall i = 1,R \ (1241) \qquad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{pour } r = 0 \qquad (1242)$$

$$\frac{\partial \xi^i}{\partial z} = 0 \quad \text{pour} \quad z = L \quad \forall i = 1,R \ (1245) \qquad -K_r \frac{\partial T}{\partial r} = h_p(T-T_p) \text{pour } r=R_R \qquad (1243)$$

$$\frac{\partial \xi^i}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R_R \ \forall i = 1,R \ (1247) \qquad -K_z \frac{\partial T}{\partial z} = v\rho \hat{c}_p (T_e - T) \text{pour } z=0 \qquad (1244)$$

$$-D_z \frac{\partial \xi^i}{\partial z} = -v\xi^i \text{pour } z = 0 \qquad (1248) \qquad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } z = L \qquad (1246)$$

$$\forall i = 1,R$$

I.II.5 - Passage en modèle adimensionnel

Nous allons effectuer un certain nombre de changements de variables, destinés à normaliser certains paramètres, fonctions et variables indépendantes, et à obtenir un modèle ayant le maximum de termes sans dimension.

Posons tout d'abord :

$$\begin{cases} \theta = \dfrac{T-T_e}{T_e} & (\Rightarrow \ T = T_e\,(1+\theta)) \quad (T_e = \text{température d'entrée}) \\[2ex] x = \mu\, z & (\mu \text{ sera déterminé ultérieurement}) \\[2ex] \rho = \dfrac{r}{R_R} \in [0,1] & \end{cases}$$

Ceci implique les transformations suivantes :

$$\frac{\partial \xi^i}{\partial z} = \mu \frac{\partial \xi^i}{\partial x} \quad ; \quad \frac{\partial \xi^i}{\partial r} = \frac{1}{R_R} \frac{\partial \xi^i}{\partial \rho}$$

$$\frac{\partial^2 \xi^i}{\partial z^2} = \mu^2 \frac{\partial^2 \xi^i}{\partial x} \quad ; \quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \xi^i}{\partial r}\right) = \frac{1}{R_R^2}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \frac{\partial \xi^i}{\partial \rho}\right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \mu\, T_e \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad ; \quad \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \mu^2\, T_e \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{R_R} T_e \frac{\partial \theta}{\partial \rho} \quad ; \quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial T}{\partial r}\right) = \frac{1}{R_R^2} T_e \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial \rho}\right)$$

Les équations (1231, 1232, 1233) deviennent :

$$\begin{cases} -v\mu \dfrac{\partial \xi^i}{\partial x} + \mu^2 D_z \dfrac{\partial^2 \xi^i}{\partial x^2} + \dfrac{1}{R_R^2} D_r \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \dfrac{\partial \xi^i}{\partial \rho}\right) + Q\, r^i = 0 & (1251) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \forall i = 1,2..R & \\[2ex] -v\, C_p\, \mu\, T_e \dfrac{\partial T}{\partial x} - r^i \Delta H_i + K_z \mu^2 T_e \dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dfrac{K_r T_e}{R_R^2}\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \dfrac{\partial v}{\partial \rho}\right) = 0 & (1252) \end{cases}$$

$$C_j = C_j^\circ + \frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{R} \alpha_{ij}\, \xi^i \qquad \forall j = 1,2..N \qquad (1233)$$

L'exemple que nous traiterons dans la troisième partie étant à stoechiométrie unique, nous allons poursuivre les calculs dans ce cas.

Nous préconisons à présent le changement de fonction :

$$g_j = 1 + \left(\frac{\alpha_j}{QC_j^\circ}\right)\xi \quad \Rightarrow \quad \xi = \left(\frac{QC_j^\circ}{\alpha_j}\right)(g_j - 1)$$

D'où les relations :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \xi}{\partial x} = \left(\dfrac{QC_j^\circ}{\alpha_j}\right) \dfrac{\partial g_j}{\partial x} \quad ; \quad \dfrac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = \left(\dfrac{QC_j^\circ}{\alpha_j}\right) \dfrac{\partial^2 g_j}{\partial x^2} \\ \dfrac{\partial \xi}{\partial \rho} = \left(\dfrac{QC_j^\circ}{\alpha_j}\right) \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho} \quad ; \quad \dfrac{1}{\rho} \dfrac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \dfrac{\partial \xi}{\partial \rho}\right) = \dfrac{1}{\rho} \left(\dfrac{QC_j^\circ}{\alpha_j}\right) \dfrac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho}\right) \end{cases}$$

(1251) et (1233) deviennent :

$$\begin{cases} \dfrac{-v\,\mu\,QC_j^\circ}{\alpha_j} \left(\dfrac{\partial g_j}{\partial x}\right) + \dfrac{D_z\,\mu\,QC_j^\circ}{\alpha_j} \left(\dfrac{\partial^2 g_j}{\partial x^2}\right) + \dfrac{D_r\,QC_j^\circ}{\alpha_j R_R^2} \dfrac{1}{\rho} \left(\dfrac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho}\right)\right) + Q_r = 0 \quad \forall j = 1,2..N \quad (1251\text{ bis}) \\ C_j = C_j^\circ\, g_j \quad (1233\text{ bis}) \end{cases}$$

Soit donc le système d'équations :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial g_j}{\partial x} = \dfrac{D_z\,\mu}{v} \dfrac{\partial^2 g_j}{\partial x^2} + \dfrac{D_r}{R_R^2\,v\,\mu} \dfrac{1}{\rho} \dfrac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho}\right) + \dfrac{\alpha_j\,r}{v\,\mu\,C_j} \quad \forall j = 1,2,..N \quad (1253) \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial x} = \dfrac{K_z\,\mu}{v\,C_p} \dfrac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \dfrac{K_r}{R_R^2\,v\,\mu\,C_p} \dfrac{1}{\rho} \dfrac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho}\right) - \dfrac{r\,\Delta H}{v\,C_p\,\mu\,T_e} \quad (1254) \\ C_j = C_j^\circ\, g_j \quad (1233\text{ bis}) \end{cases}$$

Les conditions aux limites deviennent :

(1241) $\longrightarrow \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho} = 0$ pour $\rho = 0$ $\forall j = 1,2,..N$ (1255)

(1242) $\longrightarrow \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0$ pour $\rho = 0$ (1256)

(1243) $\longrightarrow \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = -\,Bi\,\theta$ pour $\rho = 1$ (1257)

(Bi = nombre de Biot)

(1244) $\longrightarrow \dfrac{\partial \theta}{\partial x} = \dfrac{v\,C_p}{K_z\,\mu}\,\theta$ pour $x = 0$ (1258)

(1246) $\longrightarrow \dfrac{\partial \theta}{\partial x} = 0$ pour $x = \mu\,L$ (1259)

(1245) $\longrightarrow \dfrac{\partial g_j}{\partial x} = 0$ pour $x = \mu\,L$ (125A)

(1247) $\longrightarrow \dfrac{\partial g_j}{\partial \rho} = 0$ pour $\rho = 1$ (125B)

(1248) $\longrightarrow \dfrac{\partial g_j}{\partial x} = \dfrac{v}{\mu\,D_z}\,(g_j - 1)$ $\forall j = 1,2...N$, pour $x = 0$ (125C)

L'exemple traité plus loin en simulation correspond à un cas où la température d'entrée est identique à la température de la paroi, le réacteur étant placé dans un bain réfrigérant ; c'est grâce à cette hypothèse qu'a été établie la relation (1257).

Enfin, pour alléger l'écriture, définissons les grandeurs suivantes :

$$\alpha_L = \frac{K_z\ \mu}{v\ C_p}\ ,\quad \alpha_R = \frac{K_r}{R_R^2\ v\ C_p\ \mu}\ ,\quad \beta_L = \frac{D_z\ \mu}{v}\ ,\quad \beta_R = \frac{D_r}{R_R^2\ v\ \mu}$$

$$\Psi = \frac{r}{v\ \mu\ C_j^\circ} \qquad A = \frac{\Delta H\ C_j^\circ}{C_p\ T_e}$$

Nous obtenons ainsi le modèle complet à stoechiométrie unique :

$$\frac{\partial g_j}{\partial x} = \beta_L \frac{\partial^2 g_j}{\partial x^2} + \beta_R \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \frac{\partial g_j}{\partial \rho}\right) + \alpha_j\ \Psi \qquad \forall j = 1,2,\ldots N \qquad (125D)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \alpha_L \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \alpha_R \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial \rho}\right) - A\ \Psi \qquad (125E)$$

$$C_j = C_j^\circ\ g_j$$

$$\frac{\partial g_j}{\partial \rho} = 0 \quad \text{pour } \rho = 0 \quad \forall j = 1,2,..N \ (125F) \qquad \frac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0 \quad \text{pour } \rho = 0 \qquad (125J)$$

$$\frac{\partial g_j}{\partial \rho} = 0 \quad \text{pour } \rho = 1 \quad \forall j = 1,2,..N \ (125G) \qquad \frac{\partial \theta}{\partial \rho} = -Bi\ \theta \text{ pour } \rho = 1 \ (125K)$$

$$\frac{\partial g_j}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = \mu L \ \forall j = 1,2,..N \ (125H) \qquad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = \mu L \qquad (125L)$$

$$\frac{\partial g_j}{\partial x} = \frac{1}{\beta_L}(g_j - 1) \text{ pour } x = 0 \ \forall j=1,2..N (125I) \qquad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{\alpha_L}\theta \text{ pour } x = 0 \ (125M)$$

I.II.6 - Remarques - Conclusion

* Le paramètre μ a été introduit artificiellement. Sa détermination utilisera l'expression analytique de la vitesse de réaction. Dans le cas d'une réaction du type $A \rightleftarrows B$ du premier ordre, cette vitesse s'écrit :

$r = K_o\ C\ e^{-\frac{E_o}{RT}} - K_1(C_o - C)\ e^{-\frac{E_1}{RT}}$, où K_o et K_1 sont les facteurs préexponentiels de fréquence, et E_o et E_1 les énergies d'activation.

Sachant que $C = C^\circ g$, en posant $q_o = \frac{E_o}{kT_e}$, $q_1 = \frac{E_o}{RT_e}$, et en utilisant certains des changements de variable précédents, on obtient :

$$r = K_o\, C^\circ\, e^{-q_o} \left(g\, e^{\frac{q_o\theta}{1+\theta}} - \left(\frac{K_1}{K_o}\right) e^{q_o - q_1} (1-g)\, e^{\frac{q_1\theta}{1+\theta}}\right)$$

expression dans laquelle $\left(\frac{K_1}{K_o}\, e^{q_o - q_1}\right)$ est une constante notée $\overleftarrow{k}$ dans la suite.

Si l'on désire obtenir une vitesse de réaction adimensionnelle, on peut poser :

$$\Psi = \frac{r}{K_o C^\circ e^{-q_o}} = g\, e^{\frac{q_o\theta}{1+\theta}} - \overleftarrow{k}\,(1-g)\, e^{\frac{q_1\theta}{1+\theta}}$$

Sachant que $\Psi = \dfrac{r}{v\,\mu\, C^\circ}$, μ se trouve automatiquement déterminé et vaut :

$$\mu = \frac{K_o\, e^{-q_o}}{v}\,.$$

* La modélisation en régime transitoire s'obtient facilement : il suffit en effet, dans les équations (1211) et (1221), de remplacer les seconds membres nuls par des termes d'accumulation, respectivement $\frac{\partial C_j}{\partial t}$ et $\frac{\partial T}{\partial r}$.

Il convient également d'ajouter des conditions aux limites du type $\begin{cases} C_{j(t=0)} = C_j(0) \\ T_{(t=0)} = T(0) \end{cases}$, et éventuellement de considérer comme fonctions du temps les paramètres susceptibles de varier (température de paroi, lois cinétiques, etc...)

* On peut également |10| faire intervenir dans le modèle la présence du catalyseur, de façon explicite, en ajoutant des équations du type :

$$\begin{cases} \alpha\,(g - g_{cat}) = \beta\,\mathcal{R}(g_{cat}, \theta_{cat}) \\ \alpha'(\theta - \theta_{cat}) = \beta'\,\mathcal{R}(g_{cat}, \theta_{cat}) \end{cases}$$

où g_{cat} et θ_{cat} sont respectivement les concentration et température adimensionnelles à la surface d'un grain de catalyseur, $\mathcal{R}$ étant la loi cinétique exprimée en fonction de ces deux dernières grandeurs.

CONCLUSION

A l'issue de cette première partie, nous nous trouvons en possession de deux modèles mathématiques : l'un, très simple, représente un échangeur de chaleur cylindrique, et l'autre est l'écriture théorique d'un réacteur tubulaire diffusionnel bidimensionnel.

Remarquons que les deux modèles sont aux dérivées partielles, et que la plupart de leurs conditions aux frontières sont données en deux extrêmités. Le deuxième est, en outre, constitué d'un certain nombre d'équations, couplées par l'intermédiaire d'un terme non différencié non linéaire.

Nous allons maintenant appliquer à ces modèles un certain nombre d'algorithmes de simulation et de commande, qui feront l'objet des parties suivantes.

DEUXIEME PARTIE

METHODES DE SIMULATION D'UN ECHANGEUR THERMIQUE

II-I - DESCRIPTION DES PROCESSUS PILOTES -

Les travaux présentés dans ce deuxième chapitre ont été entrepris à la demande de la Raffinerie ANTAR de Donges (Loire-Atlantique). Ils concernent la simulation numérique des transferts thermiques dans un tube chauffé à la paroi. Les résultats obtenus en simulation seront comparés aux valeurs expérimentales relevées dans les deux processus suivants :

II-I-1 - "Pseudo-Pilote" de Laboratoire |23|

Cet appareil, uniquement destiné à effectuer des mesures de température en milieu non réactionnel, se compose simplement d'un tube en acier, de longueur 140 cm et de diamètre intérieur 10,2 cm, dont la paroi est chauffée par quatre résistances électriques. Ce tube peut être rempli ou non de catalyseur ; on y fait pénétrer un fluide gazeux, à une température réglable à l'aide d'un préchauffeur (de 20° à 400°C suivant les essais). Les températures sont mesurées en quelques points de l'axe, et le long du rayon situé à 104 cm de l'entrée.

II-I-2- Pilote semi-industriel de reforming catalytique |23|

Cette fois, il s'agit d'un processus beaucoup plus complexe : le réacteur cylindrique, destiné à l'étude des réactions de reforming mesure 5,6 m de haut, pour un diamètre de 9,4 cm, et est entouré de toute l'infrastructure nécessaire à une unité semi-industrielle. Le chauffage en est effectué par rayonnement, au moyen d'une série d'anneaux chauffants appelés *"radiants"* pouvant donner un profil de température à la paroi non constant le long du réacteur. Les températures sont mesurées axialement, et radialement à environ 1,50 m de l'entrée. C'est essentiellement pour cet appareil qu'ont été effectuées les simulations présentées plus loin.

II-II - RESOLUTION ANALYTIQUE -

Avant d'exposer les différentes méthodes utilisées, nous allons rappeler le problème qui nous a été soumis. Dans le cas d'un réacteur cylindrique industriel, si l'on porte la paroi à une température élevée à l'aide d'une méthode de chauffage par rayonnement, existe-t-il un gradient radial de température important, et ne risque-t-on pas de détruire la catalyseur près de la paroi ? En outre, peut-

on en simulation prévoir le comportement thermique du processus en cas de changement de conditions opératoires (températures d'entrée et de paroi, vitesse, diamètre du tube, etc...)?

Le modèle thermique du système étant très simple, ce type de simulation ne présente aucune difficulté. Cependant, il nous a paru intéressant, à propos de cette étude, d'utiliser plusieurs méthodes,à titre comparatif, et de façon à examiner plusieurs modes de simulation dans les équations aux dérivées partielles. Signalons en outre, que,les résultats devant être rapidement transmis à la Société ANTAR, nous n'avons retenu que des méthodes rapides à mettre en oeuvre. Avant d'en aborder la description, nous allons calculer la solution analytique du système étudié, qui est représenté par les équations suivantes : (cf 1er chapitre).

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial\theta}{\partial\rho} + \frac{\partial^2\theta}{\partial\rho^2} = \frac{\partial\theta}{\partial\tau} \quad (2221)$$

avec :
$$\begin{cases} \tau = 0 : \quad \theta = 1 \quad \forall\rho \in [0,1] & (2222) \\ \rho = 0 : \quad \frac{\partial\theta}{\partial\rho} = 0 & (2223) \\ \rho = 1 : -\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = Bi\theta \qquad (Bi = \frac{h_w R}{K_e}) & (2224) \end{cases}$$

Cherchons une solution de la forme :

$$\theta(\rho,\tau) = X(\rho)Y(\tau)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = X'Y \qquad \frac{\partial^2\theta}{\partial\rho^2} = X''Y \qquad \frac{\partial\theta}{\partial\tau} = XY'$$

L'équation (2221) devient :

$$\frac{1}{\rho}X'Y + X''Y = XY'$$

Divisons par $XY \neq 0$

$$\frac{1}{\rho}\frac{X'}{X} + \frac{X''}{X} = \frac{Y'}{Y} = C$$

Pour rendre compte du fait que $\theta \to 0$ qd $\tau \to \infty$ nous devons prendre C négatif soit $C = -\beta^2$.

Nous obtenons deux équations différentielles ordinaires découplées :

$$\begin{cases} Y' + \beta^2 Y = 0 & (2225) \\ X'' + \frac{1}{\rho}X' + \beta^2 X = 0 & (2226) \end{cases}$$

L'équation (2226) est une équation de Bessel d'ordre 0 dont la solution générale est :

$$X = C_1 J_0(\beta\rho) + C_2 Y_0(\beta\rho)$$

J_0 : fonction de Bessel d'ordre zéro

Y_0 : fonction de Weber-Neumann de seconde espèce

$Y_0(\beta\rho) \to -\infty$ quand $\rho \to 0$ d'où $C_2 = 0$, la solution devant être non infinie

La solution de (2226) se réduit à

$$X = C_1 J_0(\beta\rho)$$

Rendons compte de la condition aux limites sur ρ :

pour $\rho = 1$ $\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = Bi\theta$ d'où : $\beta J_1(\beta) - BiJ_0(\beta) = 0$

Les racines β_k de cette équation sont réelles et en nombre infini |1|.

Les équations (2225) et (2226) contiennent le même paramètre β, d'où (2221) sera satisfaite par :

$\theta_i(\rho,\tau) = \alpha_i e^{-\beta_i^2\tau} J_0(\beta_i\rho)$. Le système étant linéaire en θ,

on aura $\theta(\rho,\tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \theta_i(\rho,\tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i e^{-\beta_i^2\tau} J_0(\beta_i\rho)$

Nous rendons compte maintenant de la condition aux limites sur τ ce qui nous permettra de déterminer les α_i.

Pour $\tau = 0$, prenons la condition générale $\theta = \phi(\rho)$ [ici $\phi(\rho) = 1$]

Nous devons avoir

$$\theta(\rho,0) = \phi(\rho) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i J_0(\beta_i\rho) \qquad (2227)$$

Nous obtenons ainsi une décomposition de $\phi(\rho)$ en série de fonctions de Bessel sur l'intervalle [0,1]. Nous calculons les α_i en utilisant les propriétés d'orthogonalité des fonctions de Bessel |2|

$$\begin{cases} I = \int_0^1 \rho J_\nu(\beta_i\rho) J(\beta_j\rho)\, d\rho = 0 & \text{si } i \neq j \text{ et } \forall\nu \\ I = \frac{1}{2} J_{\nu+1}^2(\beta_i) & \text{si } i = j \end{cases}$$

Multiplions les 2 membres de (2227) par $\rho J_0(\beta_i\rho)$ et intégrons sur [0,1]

$$\int_0^1 \rho J_0(\beta_u\rho)\phi(\rho)d\rho = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \int_0^1 \rho J_0(\beta_j\rho)J_0(\beta_i\rho)d\rho$$

$$= \frac{\alpha_i}{2} J_1^2(\beta_i)$$

Soit

$$\alpha_i = \frac{2}{J_1^2(\beta_i)} \int_0^1 \rho J_0(\beta_i\rho)\ \phi(\rho)d\rho$$

Dans notre cas particulier où $\phi(\rho) = 1$ nous obtenons pour solution du modèle (2221)

$$\theta(\rho,\tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \left[\frac{2}{J_1^2(\beta_i)} \int_0^1 \rho J_0(\beta_i\rho)d\rho\right] \left[J_0(\beta_i\rho)\right] \left[e^{-\beta_i^2\tau}\right]$$

Nous pouvons calculer analytiquement $\int_0^1 \rho J_0(\beta_i\rho)d\rho$ grâce aux relations :

$$\begin{cases} J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z) \\ z^{-n}\ J_{n+1}(z)dZ = -z^{-n}J_n(z) \end{cases} \qquad |2|$$

avec $\begin{cases} z = \beta_i\rho \\ dz = \beta_i d\rho \\ n = -1 \end{cases}$

$$\int \beta_i(\beta_i\rho)^{-(-1)}J_0(\beta_i\rho)d\rho = -(\beta_i\rho)^{-(-1)}J_{-1}(\beta_i\rho) = \beta_i\rho J_1(\beta_i\rho)$$

$$\int_0^1 \rho J_0(\beta_i\rho)d\rho = \left[\frac{1}{\beta_i}\ \rho J_1(\beta_i\rho)\right]_0^1 = \frac{J_1(\beta_i)}{\beta_i}$$

d'où la solution finale :

(2228) $$\theta(\rho,\tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2}{\beta_i J_1(\beta_i)} \times J_0(\beta_i\rho) \times e^{-\beta_i^2\tau}$$ avec β_i solution de :

$$\beta J_1(\beta) - \beta_i J_0(\beta) = 0$$

Nous pouvons faire à propos de cette expression la remarque suivante :

L'expression de $\theta(\rho,\tau)$ est obtenue sous forme d'une décomposition sur une base de fonctions. Il serait donc possible d'utiliser cette relation dans un but de simulation (il s'agit en effet d'une méthode classique). Nous ne l'avons cependant pas fait, car des études beaucoup plus détaillées sur ce type de procédure seront présentées dans les chapitres suivants. D'autre

part, signalons que le résultat ci-dessus peut être retrouvé rapidement par une procédure de transformation intégrale, comme celle décrite dans la partie suivante.

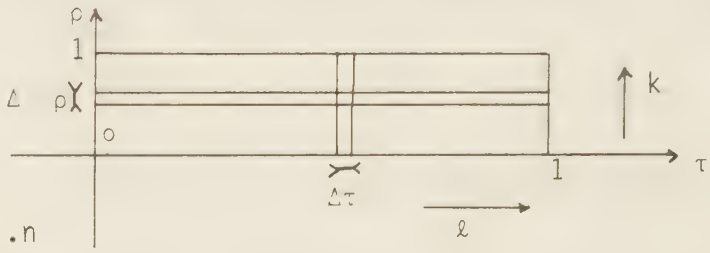
Nous allons donc présenter maintenant trois méthodes de simulation du système (2221) et de ses conditions aux limites.

II-III - SIMULATION

II-III-1 - Discrétisation |13|

C'est la méthode la plus simple et la plus rapide.

Soit le maillage (k,ℓ) :



Posons $\begin{cases} \rho = k\Delta\rho & k = 0,1\ldots n \\ \tau = \ell\Delta\tau & \ell = 0,1\ldots m \end{cases}$

La relation itérative correspondant à l'équation (2221) s'écrit, après discrétisation directe des dérivées :

$$\theta_{k,\ell+1} = \theta_{k,\ell} + \frac{\Delta\tau}{\Delta\rho^2}\left[\frac{1}{k}(\theta_{k+1,\ell}-\theta_{k,\ell}) + \theta_{k+1,\ell} - 2\theta_{k,\ell} + \theta_{k-1,\ell}\right]$$

$$\text{pour}\begin{cases} k = 1,2\ldots n-1 \\ \ell = 1,2\ldots m \end{cases}$$

Le calcul s'effectue donc par déplacements successifs le long de l'axe.

Les conditions aux limites se discrétisent également, de la manière suivante :

- (2222) $\Rightarrow$ $\theta(k,0) = 1$
- (2223) $\Rightarrow$ nous utilisons la règle de l'Hopital :

$$\lim \frac{1}{\rho}\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = \lim \frac{\int_0^{\theta(\Delta\rho)} \partial\theta}{\int_0^{\Delta\rho} \rho d\rho} = 2\,\frac{\theta(\Delta\rho,\tau) - \theta(0,\tau)}{\Delta\rho^2}$$

d'où la relation : $\theta_{0,\ell+1} = \theta_{0,\ell} + \frac{4\Delta\tau}{\Delta\rho^2}\left[\theta(1,\ell)-\theta(0,\ell)\right]$

- (2224) $\Rightarrow$ $\theta(n,\ell) = \frac{1}{1+Bi_{\Delta\rho}}\,\theta(n-1,\ell)$

Nous ne nous attarderons pas sur cet aspect de la simulation; disons simplement que les résultats sont corrects et obtenus immédiatement, à condition de choisir un $\Delta\tau$ et $\Delta\rho$ suffisamment petits pour avoir une précision acceptable, mais assez grands pour éviter les erreurs numériques.

II-III-2 - Approximation polynôminale

L'allure des courbes radiales obtenus par la méthode ci-dessus rend plausible une approximation polynôminale de ces profils.

Nous traiterons cette fois un cas où la température de paroi peut varier ; les équations seront donc, en posant $\theta = \frac{T-T_e}{T_e}$ et $\theta_w = \frac{T_w-T_e}{T_e}$

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial\theta}{\partial\rho} + \frac{\partial\theta}{\partial\rho^2}\right] = \frac{\partial^2\theta}{\partial\tau} \qquad (2321)$$

avec, pour
$$\begin{cases} \rho = 0 \ : \ \frac{\partial\theta}{\partial\rho} = 0 \quad \forall\tau & (2322) \\ \rho = 1 \ : \ \frac{\partial\theta}{\partial\rho} = -Bi(\theta-\theta_w) \ \forall\tau & (2333) \\ \tau = 0 \ : \ \theta = 0 \quad \forall\rho & (2334) \end{cases}$$

Discrétisons tout d'abord la variable axiale : $\tau = k\Delta\tau$. Plaçons nous à l'abcisse k ; le profil radial à l'abcisse (k-1) est supposé connu. Notons $\theta(\rho)$ la température radiale à l'abcisse k.

L'équation (2321) devient l'équation différentielle à valeurs limites en deux points :

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho}\frac{d\theta}{d\rho} + \frac{d^2\theta}{d\rho^2} = \frac{\theta}{\Delta\tau} - \frac{1}{\Delta\tau}\ \theta^{k-1}(\rho) & (2325) \\ \text{avec } \frac{d\theta}{d\rho}(0) = 0 \quad (2326) \quad \text{et } \frac{d\theta}{d\rho} = -Bi(\theta-\theta_w) \text{ pour } \rho = 1 \quad (2327) \end{cases}$$

Prenons pour $\theta(\rho)$ l'approximation :

$$\theta(\rho) \simeq t(\rho) = a\rho^3 + b\rho^2 + c\rho + T_0$$

Il est commode, d'autre part, de poser $t(1) = T_1$

C'est-à-dire : $a+b+c+T_0 = T_1$ (2328)

$t(\rho)$ devra vérifier les conditions aux limites (2326) (2327), ce qui conduit aux relations :

$$\begin{cases} c = 0 & (2329) \\ 3a + 2b + BiT_1 = Bi\theta_w & (232\ A) \end{cases}$$

Nous chercherons à faire passer au mieux le polynôme $t(\rho)$

par un certain nombre de points du rayon :

$$\rho_i = \frac{i-1}{N-1} \text{ (N points)}$$

En chaque ρ_i, la solution exacte θ vérifie la relation :

$$\left\{ \frac{1}{\rho}\frac{d\theta}{d\rho} + \frac{d^2\theta}{d\rho^2} - \frac{\theta}{\Delta\tau} \right\}_{\rho=\rho_i} = \frac{-\theta^{k-1}(\rho_i)}{\Delta\tau} = \phi_i \qquad (232\ B)$$

En approximant $\theta(\rho)$ par $t(\rho)$, il faudra donc minimiser :

$$J = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left(\frac{1}{\rho}\frac{dt}{d\rho} + \frac{d^2t}{d\rho^2} - \frac{t}{\Delta\tau}\right)_{\rho=\rho_i} - \phi_i \right\}^2 \qquad (232\ C)$$

, par rapport à t, c'est-à-dire à $[a\ b\ T_0\ T_1]$

Si l'on remplace $t(\rho)$ par son expression dans l'équation (232 B), on obtient :

$$a\left[9\rho - \frac{1}{\Delta\tau}\rho^3\right] + b\left[4 - \frac{1}{\Delta\tau}\rho^2\right] - \frac{T_0}{\Delta\tau} = \phi$$

$$\text{pour } \rho = \rho_i \quad \forall i = 1,2\ldots N \qquad (232\ D)$$

D'autre part, (2328), (2329), (232 A) donnent :

$$T_0 = \theta_w - a\left[\frac{3}{Bi} + 1\right] - b\left[\frac{2}{Bi} + 1\right]$$

D'où le système à résoudre :

$$a\left[9\rho_i - \frac{1}{\Delta\tau}\rho_i^3 + \frac{3}{Bi\Delta\tau} + \frac{1}{\Delta\tau}\right] + b\left[4 - \frac{1}{\Delta\tau}\rho_i^2 + \frac{2}{Bi\Delta\tau} + \frac{1}{\Delta\tau}\right] = \phi_i + \frac{\theta_w}{\Delta\tau}$$

$$\forall i = 1,2\ldots N \qquad \text{et } \rho_i = \frac{i-1}{N-1}$$

Posons :

$$\begin{cases} p_i = 9\dfrac{i-1}{N-1} - \dfrac{1}{\Delta\tau}\left(\dfrac{i-1}{N-1}\right)^3 + \dfrac{3}{Bi\Delta\tau} + \dfrac{1}{\Delta\tau} \\ q_i = 4 - \dfrac{1}{\Delta\tau}\left(\dfrac{i-1}{N-1}\right)^2 + \dfrac{2}{Bi\Delta\tau} + \dfrac{1}{\Delta\tau} \\ \psi_i = \phi_i + \dfrac{\theta_w}{\Delta\theta} \end{cases}$$

et $\quad \underline{x}^T = [a\ \ b] \quad , \quad \underline{B}^T = [\psi_1\ \ \psi_2\ \cdots\ \psi_N]$

$$A = \begin{bmatrix} p_1 & q_1 \\ p_2 & p_2 \\ \vdots & \vdots \\ p_N & q_N \end{bmatrix} Q_2$$

Le système s'écrit $A\underline{x} = \underline{B}$, et sa solution au sens des moindres carrés vaut : $\underline{x} = (A^T A)^{-1} A^T B$

En posant $D = \dfrac{1}{(\sum_{i=1}^{N} p_i q_i)^2 - \sum_{i=1}^{N} p_i^2 \sum_{i=1}^{N} q_i^2}$

$$r_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} p_i^2}{D} \qquad r_2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} q_i^2}{D} \qquad s = \frac{\sum_{i=1}^{N} p_i q_i}{D}$$

Les coefficients u et b sont donnés par les relations :

$$\boxed{\begin{cases} a = \sum_{i=1}^{N} \Psi_i \, (-r_2 p_i + s q_i) \\ b = \sum_{i=1}^{N} \Psi_i \, (s p_i - r_1 q_i) \end{cases}}$$

avec $T_0 = \theta_W - a \left[\frac{3}{Bi} + 1\right] - b \left[\frac{2}{Bi} + 1\right]$

le polynôme est complètement défini ; les coefficients a, b, T_0 devront être déterminés à chaque pas de calcul le long de l'axe.

La résolution de l'équation différentielle (2325) à valeurs limites en deux points pourrait également être effectuée par les méthodes suivantes :

- Runge-Kutta-Merson avec tir
- Détermination des fonctions de Green G (cf Annexe III a) et calcul numérique de l'intégrale : $\int_0^1 G(x,\xi) \left[-\frac{1}{\Delta\tau} \theta^{k-1}(\xi)\right] d\xi$

Dans la procédure que nous venons de décrire, il n'y a aucune intégration numérique, ni recherche de minimum à effectuer ; c'est pourquoi nous l'avons utilisée de préférence aux deux autres ; les résultats sont obtenus très rapidement, avec une bonne précision, et sans trop de problèmes de choix de pas ($\Delta\tau$ et N).

Si, dans notre cas, un polynôme du troisième degré suffisait parfaitement à approximer le profil radial, il serait souhaitable cependant de prévoir,dans certains problèmes, l'utilisation de polynômes de degrés quelconques. Mais, ceci demanderait une inversion numérique de la matrice $A^T A$, laquelle peut être très mal conditionnée, car elle possède des termes en $\frac{1}{\Delta\tau}$. Pour cette raison, nous avons développé une méthode utilisant les propriétés d'orthogonalité des polynômes de CHEBYSHEV |25|.

II-III-3 - Approximation polynôminale de degré quelconque

Le lecteur pourra trouver en Annexe(II a)les rappels nécessaires concernant les polynômes de CHEBYSHEV ; le modèle à simuler est toujours donné par les équations (2321), (2322), (2323), (2324).

II-III-3-1 - Transformation de l'équation en un système linéaire

Nous nous plaçons à l'abcisse $\tau = k\Delta\tau$, et nous noterons $\theta(\rho)$ la température radiale à cette abcisse.

Nous supposerons que $\theta(\rho)$ est décomposable sur une base de fonctions :

$$\theta(\rho) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \phi_i(\rho)$$

nous en prendrons une somme partielle d'ordre m :

$$\theta(\rho) \simeq \sum_{i=0}^{m} c_i \phi_i(\rho)$$

et nous choisirons, comme fonctions de base des polynômes de degré croissant :

$$\phi_i(\rho) = \sum_{j=0}^{i} a^i_j \rho^j$$

enfin nous supposerons (et cela sera justifié par la suite) : $m = 2\ell$

$\theta(\rho)$ s'écrira donc $\boxed{\theta(\rho) = \sum_{i=0}^{n=2\ell} \left(c_i \sum_{j=0}^{i} a^i_j \rho^j\right)}$

D'où :

$$\frac{d\theta}{d\rho} = \sum_{i=1}^{m} c_i \sum_{j=1}^{i} j a^i_j \rho^{j-1}$$

$$\frac{d^2\theta}{d\rho^2} = \sum_{i=2}^{m} c_i \sum_{j=2}^{i} a^i_j j(j-1)\rho^{j-2}$$

Reportons ces trois expressions dans l'équation (2321) :

$$\sum_{i=1}^{m} c_i \sum_{j=1}^{i} j a^i_j \rho^{j-1} + \rho \sum_{i=2}^{m} c_i \sum_{j=2}^{i} a^i_j j(j-1)\, \rho^{j-2} = \rho \frac{\partial\theta}{\partial\tau}$$

$$c_1 a^1_1 + \sum_{i=2}^{m} c_i \left[\sum_{j=1}^{i} j a^i_j \rho^{j-1} + \sum_{j=2}^{i} a^i_j j(j-1)\rho^{j-1}\right] = \rho \frac{\partial\theta}{\partial\tau}$$

$$c_1 a^1_1 + \sum_{i=2}^{m} c_i \left[a^i_1 + \sum_{j=2}^{i} (j a^i_j \rho^{j-1} + a^i_j j(j-1)\, \rho^{j-1})\right] = \rho \frac{\partial\theta}{\partial\tau}$$

La relation (2322) donne :

$$\sum_{i=1}^{m} c_i a_1^i = 0 \quad (2332)$$; reportons-la dans l'équation précédente :

il reste :

$$\sum_{i=2}^{m} c_i \sum_{j=2}^{i} j^2 a_j^i \rho^{j-1} = \rho \frac{\partial\theta}{\partial\tau} \quad (2333)$$

Soit $\frac{\partial\theta}{\partial\tau} = \frac{\theta^k(\rho) - \theta^{k-1}(\rho)}{\Delta\tau}$; on pose $\begin{cases} \theta^{k-1}(\rho) = t(\rho) \\ \theta^{k}(\rho) = \theta(\rho) \end{cases}$

L'équation (2333) s'écrit :

$$\sum_{i=2}^{m} c_i \left(\sum_{j=2}^{i} j^2 a_j^i \rho^{j-2} \right) - \frac{1}{\Delta\tau} \sum_{i=0}^{m} c_i \left(\sum_{j=0}^{i} a_j^i \rho^j \right) = - \frac{t(\rho)}{\Delta\tau}$$

C'est-à-dire :

$$- \frac{1}{\Delta\tau} c_0 a_0^0 - \frac{1}{\Delta\tau} | c_1 (a_0^1 + a_1^1 \rho) | + \sum_{i=2}^{m} c_i s^i = - \frac{t(\rho)}{\Delta\tau}$$

avec $s^i = \sum_{j=2}^{i} (j^2 a_j^i \rho^{j-2} - \frac{1}{\Delta\tau} \sum_{j=0}^{i} a_j^i \rho^i$

$$s^i = \sum_{j=2}^{i} [(j^2 a_j^i) - \frac{1}{\Delta\tau} a_{j-2}^i] \rho^{j-2} - \frac{1}{\Delta\tau} a_{i-1}^i \rho^{i-1} - \frac{1}{\Delta\tau} a_i^i \rho^i \quad (2334)$$

Si l'on définit, de plus : $S^0 = - \frac{1}{\Delta\tau} a_0^0$ et $S^1 = - \frac{1}{\Delta\tau}(a_0^i + a_i \rho)$,

nous avons la relation : $\boxed{\sum_{i=0}^{m} c_i s^i(\rho) = - \frac{t(\rho)}{\Delta\tau}}$

Cette équation représente l'équation aux dérivées partielles (2321), une fois discrétisée la variable axiale, et après y avoir explicité l'approximation polynôminale de la solution.

Les $s^i(\rho)$ sont des polynômes de degré i. Afin de pouvoir utiliser une méthode analogue à celle du paragraphe précédent, il serait souhaitable de posséder l'expression analytique de la matrice inverse $(A^T A)^{-1}$; c'est pourquoi nous allons astreindre les s^i à être des polynômes de Chebyshev.

Soit $s^i(\rho) \equiv T^i(\rho) \quad \forall i, \forall \rho$

Posons $T^i(\rho) = \sum_{j=0}^{i} \tau_j^i \rho^j$

les τ_j^i sont les coefficients des polynômes de Chebyshev

Pour éviter des confusions avec la variable axiale "τ", nous appellerons par la suite cette dernière "y".

La définition des s^i (2334) permet d'établir les relations de récurrence suivantes entre les a^i_j et les τ^i_j :

$$\begin{cases} -\frac{1}{\Delta y}\, a^0_0 = \tau^0_0 \\ -\frac{1}{\Delta y}\, a^1_0 = \tau^1_0 \\ -\frac{1}{\Delta y}\, a^1_1 = \tau^1_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\frac{1}{\Delta y}\, a^i_i = \tau^i_i & \text{pour } i = 2,3\ldots m \\ -\frac{1}{\Delta y}\, a^i_{i-1} = \tau^i_{i-1} & \\ j^2 a^i_j - \frac{1}{\Delta y}\, a^i_{j-2} = \tau^i_{j-2} & \text{pour } j = 2,3\ldots i \end{cases}$$

(en fait : $j = i, i-1, \ldots 3, 2$)

Assujettisons la condition (2332) à être vérifiée

Les c_i étant déterminés ultérieurement, (2332) sera vraie si $a^i_1 = 0$ (2335) $\forall i = 1,2\ldots m$; d'où m relations supplémentaires.

Mais ceci implique par exemple $a^1_1 = 0^{(*)}$, c'est-à-dire $\tau^1_1 = 0$. Or $\tau^1_1 = 1$. En effet les τ^i_1 ne sont nuls que pour $i = 2k$. Nos conditions seront vérifiées si l'on ne considère que les polynômes de Chebyshev de degré pair ; donc ceci revient à supposer nuls tous les c_{2k+1}.

L'approximation de θ deviendra donc :

$$\theta = \sum_{i=0}^{\ell} c_{2i} \left(\sum_{j=0}^{i} a^{2i}_{2j}\, \rho^{2j} \right) \qquad (2336)$$

d'où : $\frac{d\theta}{d\rho} = \sum_{i=1}^{\ell} c_{2i} \sum_{j=1}^{i} 2j a^{2i}_{2j} \rho^{2j-1}$

et $\frac{d^2\theta}{d\rho^2} = \sum_{i=1}^{\ell} c_{2i} \sum_{j=1}^{i} 2j(2j-1) a^{2i}_{2j} \rho^{2j-2}$

L'E.D.P. (2321) se réduira cette fois à l'expression :

$$\sum_{i=0}^{\ell} c_{2i} s_{2i} = \frac{t(\rho)}{\Delta y}$$

* D'autre part, on a également, $\forall i$: $9a^i_3 - \frac{1}{\Delta y}\, a^i_1 = \tau^i_1$; τ^i_1 et a^i_3 sont connus à cette itération ; on a ainsi généralement $a^i_1 \neq 0$, ce qui est en contradiction avec la relation (2335).

avec $\begin{cases} s_0 = -\frac{1}{\Delta y} a_0^0 \text{ et} \\ s_{2i} = \sum_{j=1}^{i} [4j^2 a_{2j}^{2i} - \frac{1}{\Delta y} a_{2j-2}^{2i}]\rho^{2j-2} - \frac{1}{\Delta y} a_{2i}^{2i}\rho^{2i} \end{cases}$

Soit $s_{2i} \equiv T_{2i}$ (polynômes de Chebyshev de degré pair)

$$\begin{cases} -\frac{1}{\Delta y} a_0^0 = \tau_0^0 \\ -\frac{1}{\Delta y} a_{2i}^{2i} = \tau_{2i}^{2i} \quad \text{pour } i = 1,2\ldots\ell \\ 4j^2 a_{2j}^{2i} - \frac{1}{\Delta y} a_{2j-2}^{2i} = \tau_{2j-2}^{2i} \quad \text{pour} \begin{cases} i = 1,2\ldots\ell \\ j = i,i-1,\ldots 1 \end{cases} \end{cases}$$

Les a^{2i} sont donc complètement déterminés par les relations récurrentes :

$$\begin{cases} a_0^0 = -\Delta y\, \tau_0^0 \\ a_{2i}^{2i} = -\Delta y\, \tau_{2i}^{2i} \\ a_{2j-2}^{2i} = -\Delta y\, |\tau_{2j-2}^{2i} - 4j^2 a_{2j}^{2i}| \end{cases} \quad \begin{cases} i = 1,2\ldots\ell \\ j = i,i-1\ldots 1 \end{cases}$$

L'équation (2321) se réduit ainsi à :

$$\boxed{\sum_{i=0}^{\ell} C_{2i} T_{2i}(\rho) = -\frac{1}{\Delta y} t(\rho)} \qquad (2337)$$

Nous devons d'autre part vérifier la condition :

$$\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = -Bi\,(\theta-\theta_w) \text{ pour } \rho = 1$$

$$\sum_{i=1}^{\ell} C_{2i} \sum_{j=1}^{i} 2ja_{2j}^{2i} = -Bi\left(\sum_{i=0}^{\ell} C_{2i} \sum_{j=0}^{i} a_{2j}^{2i}\right) + Bi\theta_w$$

$$\beta_i C_0 a_0^0 + \sum_{i=1}^{\ell} C_{2i} \left[\sum_{j=1}^{i} 2ja_{2j}^{2i} + Bi \sum_{j=0}^{i} a_{2j}^{2i}\right] = Bi\theta_w$$

Nous écrivons cette relation sous la forme :

$$\sum_{i=0}^{\ell} C_{2i}\mu_{2i} = Bi\theta_w \qquad (2338)$$

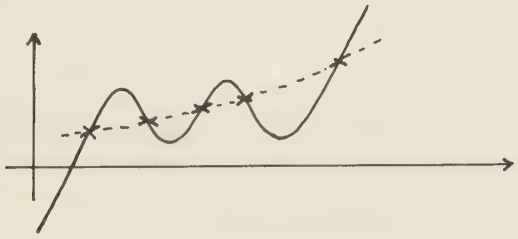
avec $\begin{cases} \mu_0 = Bia_0^0 \\ \mu_{2i} = \sum_{j=1}^{i} a_{2j}^{2i}(Bi + 2j) + Bia_0^{2i} \end{cases}$ pour $i = 1,2\ldots\ell$

Finalement, le système initial se réduit à :

$$\boxed{\begin{array}{ll} \sum_{i=0}^{\ell} C_{2i}\,\mu_{2i} = Bi\theta_w & (a) \\ \sum_{i=0}^{\ell} C_{2i}\,T_{2i}(\rho) = -\dfrac{t(\rho)}{\Delta y} & (b) \end{array} \qquad (2339)}$$

Ce système (2339) contient tout le modèle mathématique de départ. Les grandeurs μ, Bi, θ_w, $T(\rho)$ et $t(\rho)$ sont connues ou calculables. Une fois les équations (2339) résolues, l'ensemble des C_{2i} (décomposition de la solution sur la base des $\sum_{j=0}^{i} a_{2j}^{2i}\rho^{2j}$) sera complètement déterminé. La procédure est itérative: l'avancement de la solution se fait *"ligne par ligne"*, chaque ligne étant parallèle à un rayon et utilisant la précédente.

D'autre part, le système (2339) est un système linéaire ayant $(\ell+1)$ inconnues C_{2i} (i variant de 0 à ℓ). L'équation (a) est unique, alors que l'équation (b) est paramétrique en ρ, et permet de créer un système d'ordre quelconque en fixant arbitrairement un certain nombre de valeur de ρ. Si nous prenons ℓ valeurs différentes de ρ, le système est carré, et, s'il est régulier, la solution $\theta(\rho)$ est exacte en chaque point ρ choisi, mais l'approximation $\theta(\rho)$ n'est pas, pour autant, la meilleure ; par exemple, on peut très bien avoir le cas suivant :



(On notera l'analogie de ce problème avec les méthodes d'interpolation du type "Lagrange" |25|)

Définissons à présent (N+1) valeurs de ρ, par la relation :

$$\rho_i = \cos\frac{(2i-2)M}{2(n+1)} \quad (i = 1,2\ldots n+1)$$

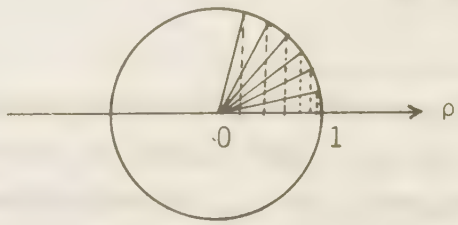
$$\rho_i \in \,]-1\,,+1[\quad (\text{ ou : } \rho_i' = \tfrac{1}{2}(\rho_i + 1);\ \ \rho_i' \in]0,1[)$$

à chaque ρ_i (ou ρ_i') correspond un $\theta^{k-1}(\rho_i) = t(\rho_i)$ connu.

Nous pouvons ainsi construire un système surabondant, auquel la résolution par la méthode dela pseudo-inverse donne une approximation de la solution au sens des moindres carrés.

Par ailleurs, l'intuition physique permet de supposer que le gradient radial de température est important au voisinage de la paroi et plus

faible vers le centre. Un choix optimal des ρ_i devra donc tenir compte de cette propriété. Nous observons que les valeurs ρ_i définies ci-dessus, en plus des propriétés mathématiques qu'il confèrent aux polynômes de Chebyshev, satisfont convenablement à cette contrainte :



D'où, enfin, le nouveau système obtenu :

$$\underline{MC} = \underline{B}$$

avec $\underline{C}^T = [C_0\ C_2\ \dots\ C_{2i}\ \dots\ C_{2\ell}]$

$$\underline{B}^T = [B i\theta_w\ \frac{-t(\rho_1)}{\Delta y}\ \frac{-t(\rho_2)}{\Delta y}\ \dots\ \frac{-t(\ell_{n+1})}{y}]$$

$\underline{C}$ est de dimension $(\ell+1)$

$\underline{B}$ est de dimension $(n+2)$

La matrice M s'écrit :

$$M = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} \mu_0 & \mu_2 & \mu_4 & & \mu_{2\ell} \\ T_0(\rho_1) & T_2(\rho_1) & T_4(\rho_1) & & T_{2\ell}(\rho_1) \\ \vdots & & & & \\ T_0(\rho_{n+1}) & T_2(\rho_{n+1}) & T_4(\rho_{n+1}) & \cdots & T_{2\ell}(\rho_{n+1}) \end{array}\right] \begin{array}{c} \uparrow \\ (n+2) \\ \downarrow \end{array} \\ \leftarrow (\ell+1) \rightarrow \end{array}$$

II-III-3-2 - <u>Résolution analytique du système linéaire</u>

La solution de ce système au sens des moindres carrés sera :

$$\underline{C} = (M^T M)^{-1} M^T \underline{B}$$

Calculons $M^T M$, puis son inverse, dont nous obtiendrons l'expression analytique.

Soit $M = \begin{bmatrix} \underline{\mu}^T \\ \cdots \\ T \end{bmatrix}$ avec $\underline{\mu}^T = [\mu_0 \ \mu_2 \ \cdots \ \mu_{2\ell}]$

$T = [T_{2i}(\rho_j)]$

$M^T = [\underline{\mu} \vdots T^T]$

$M^T M = \underline{\mu}\,\underline{\mu}^T + T^T T$

$$T^T T = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n+1} T_{2m}T_{2m}(\rho_i) & & \sum_{i=1}^{n+1} T_{2m}T_{2m'}(\rho_i) \\ & \ddots & \\ & \sum_{i=1}^{n+1} T_{2j}^2(\rho_i) & \\ & & \ddots \\ \sum_{i=1}^{n+1} T_{2k}T_{2k'}(\rho_i) & & \sum_{i=1}^{n+1} T_{2\ell}^2(\rho_i) \end{bmatrix} \qquad (\ell+1) \times (\ell+1)$$

d'après les propriétés d'orthogonalité des polynômes de Chebyshev, nous avons:

(cf Annexe II) $$T^T T = \frac{n+1}{2} \begin{bmatrix} 2 & & & & \\ & 1 & & 0 & \\ & & 1 & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

d'autre part, $$\underline{\mu}\,\underline{\mu}^T = \begin{vmatrix} \mu_0^2 & \mu_0\mu_2 & \cdots & \mu_0\mu_{2\ell} \\ \mu_2\mu_0 & \mu_2^2 & & \mu_2\mu_{2\ell} \\ \vdots & & & \\ \mu_{2\ell}\mu_0 & \cdots\cdots & & \mu_{2\ell}^2 \end{vmatrix}$$

d'où :

$$M^T M = \begin{bmatrix} \mu_0^2 + n+1 & \mu_0\mu_2 & \mu_0\mu_4 & \cdots & \mu_0\mu_{2\ell} \\ \mu_0\mu_2 & \mu_2^2 + \frac{n+1}{2} & \mu_2\mu_4 & \cdots & \mu_2\mu_{2\ell} \\ \mu_0\mu_4 & \mu_2\mu_4 & \mu_4^2 + \frac{n+1}{2} & \cdots & \mu_4\mu_{2\ell} \\ \vdots & & & & \\ \mu_0\mu_{2\ell} & \mu_2\mu_{2\ell} & \mu_4\mu_{2\ell} & \cdots & \mu_{2\ell}^2 + \frac{m+1}{2} \end{bmatrix}$$

Posons $(M^T M)^{-1} = D$ de terme général d_{ij}

D devra être symétrique ($d_{ij} = d_{ji}$)

Explicitons $(M^TM)^{-1}\ (M^TM) = I$, après avoir posé pour simplifier :

$$\alpha_i = \mu_j \quad \text{avec} \quad i = j/2+1$$

$$M^TM = \begin{bmatrix} \alpha_1^2 + n+1 & \alpha_1\alpha_2 & \alpha_1\alpha_3 & \cdots & \alpha_1\alpha_{\ell+1} \\ \alpha_1\alpha_2 & \alpha_2^2 + \frac{n+1}{2} & \alpha_2\alpha_3 & \cdots & \alpha_2\alpha_{\ell+1} \\ \vdots & & & & \\ \alpha_1\alpha_{\ell+1} & \alpha_2\alpha_{\ell+1} & \cdots & \cdots & \alpha_{\ell+1}^2 + \frac{n+1}{2} \end{bmatrix}$$

Effectuons le produit :

1ère ligne de D × 1ère col. de M^TM

$$d_{11}\alpha_1^2 + d_{11}(n+1) + d_{12}\alpha_1\alpha_2 + d_{13}\alpha_1\alpha_3 + \cdots d_{1,\ell+1}\alpha_1\alpha_{\ell+1} = 1$$

$$\Leftrightarrow \quad d_{11}(n+1) + \alpha_1 \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{1j}\alpha_j = 1 \quad : \quad \text{relation (233 A)}$$

De même :

1ère ligne de D × $k^{\text{ième}}$ col. de M^TM

$$d_{11}\alpha_1\alpha_k + d_{12}\alpha_2\alpha_k + \cdots d_{1k}\alpha_k^2 + d_{1k}\frac{n+1}{2} + \cdots d_{1,\ell+1}\alpha_{\ell+1}\alpha_k = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad d_{1k}\left(\frac{n+1}{2}\right) + \alpha_k \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{1j}\alpha_j = 0 \quad \text{pour } k = (2,3\ldots\ \ell+1) \quad \text{relations (233 B)(k)}$$

multiplions (233 A) par $\frac{\alpha_1}{2}$, et chaque (233 B) (k) par le α_k correspondant ;

Effectuons la somme des équations ainsi obtenues :

$$\frac{n+1}{2}\left[d_{11}\alpha_1 + d_{12}\alpha_2 + \cdots d_{1k}\alpha_k + d_{1,\ell+1}\alpha_{\ell+1}\right] + \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{1j}\alpha_j)\left(\frac{\alpha_1^2}{2} + \alpha_2^2 + \ldots \alpha_k^2 + \alpha_{\ell+1}^2\right) = \frac{\alpha_1}{2}$$

Posons $\bar{S}_1 = \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{1j}\alpha_j$

$$\frac{n+1}{2}\bar{S}_1 + \bar{S}_1\left[\frac{\alpha_1^2}{2} + \sum_{i=2}^{\ell+1}\alpha_i^2\right] = \frac{\alpha_1}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\bar{S}_1 = \frac{\alpha_1}{(n+1) + \alpha_1^2 + 2\sum_{i=2}^{\ell+1}\alpha_i^2}}$$

relation(233A) $\Rightarrow$ $d_{11}(n+1) + \alpha_1 \bar{S}_1 = 1$

$$\Rightarrow d_{11} = \frac{1}{n+1} \; |1 - \alpha_1 \bar{S}_1|$$

relations(233B)(k) $d_{1k} = \frac{-2}{n+1} \alpha_k \bar{S}_1$ $\qquad k = 2,3 \ldots \ell+1$

Effectuons le même raisonnement pour la $k^{\text{ième}}$ ligne de D : ($k \neq 1$)

Soit les produits :

- $k^{\text{ième}}$ ligne de D × $1^{\text{ère}}$ col. de $M^T M$:

$$d_{k1}\alpha_1^2 + d_{k1}(n+1) + d_{k2}\alpha_1\alpha_2 + \ldots d_{k,\ell+1}\alpha_1\alpha_{\ell+1} = 0$$

$$\Rightarrow d_{k1}(n+1) + \alpha_1 \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j = 0 \qquad \text{relation (233 C)}$$

- $k^{\text{ième}}$ ligne de D × $k^{\text{ième}}$ col. de $M^T M$:

$$d_{k1}\alpha_1\alpha_k + d_{k2}\alpha_2\alpha_k + \ldots d_{kk}\alpha_k^2 + d_{kk}\frac{n+1}{2} \ldots d_{k,\ell+1}\alpha_k\alpha_{\ell+1} = 1$$

$$\Rightarrow d_{kk}\frac{n+1}{2} + \alpha_k \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j = 1 \qquad \text{relation (233 D)}$$

- $k^{\text{ième}}$ ligne de D × $p^{\text{ième}}$ col. de $M^T M$ $\quad (p \neq k)$

$$d_{k1}\alpha_1\alpha_p + d_{k2}\alpha_2\alpha_p + \ldots + d_{kk}\alpha_k\alpha_p + \ldots d_{kp}\alpha_p^2 + d_{kp}\frac{n+1}{2} + \ldots d_{k,\ell+1}\alpha_{\ell+1}\alpha_p = 0$$

$$\Rightarrow d_{kp}\frac{n+1}{2} + \alpha_p \left[\sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j\right] = 0 \qquad \text{relations (233 E) (p)}$$

Multiplions (233 C) par $\frac{\alpha_1}{2}$

$$\alpha_1 d_{k1}\frac{n+1}{2} + \frac{\alpha_1^2}{2}\sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j = 0$$

Multiplions (233 D) par α_k et les (233 E) (p) par α_p, puis sommons le tout :

$$\frac{n+1}{2}\sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j + \left(\frac{\alpha_1^2}{2} + \sum_{i=2}^{\ell+1}\alpha_i^2\right)\sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j = \alpha_k$$

Soit $\bar{S}_k = \sum_{j=1}^{\ell+1} d_{kj}\alpha_j$

$$\bar{S}_k = \frac{2\alpha_k}{(n+1)+\alpha_1^2+2\sum_{i=2}^{\ell+1}\alpha_i^2} \Rightarrow \boxed{\bar{S}_k = 2\frac{\alpha_k}{\alpha_1} S_1}$$

d'où :
$$\begin{cases} d_{k1} = -\frac{1}{n+1}\alpha_1\bar{S}_k \\ d_{kk} = \frac{2}{n+1}(1-\alpha_k\bar{S}_k) \\ d_{kp} = \frac{2}{n+1}\alpha_p\bar{S}_k \qquad p = 2,3\ldots \ell+1 \quad p \neq k \end{cases}$$
$$k = 2,3\ldots \ell+1$$

Montons que la matrice obtenue est bien symétrique :

$$d_{kp} = -\frac{2}{n+1}\alpha_p\bar{S}_k = -\frac{2}{n+1}\alpha_p 2\frac{\alpha_k}{\alpha_1}\bar{S}_1 = -\frac{2}{n+1}\alpha_k 2\frac{\alpha_p}{\alpha_1}\bar{S}_1$$

$(k\neq p)$
$$= -\frac{2}{n+1}\alpha_k\bar{S}_p = d_{pk}$$

pour $p = 2,3\ldots \ell+1$

et : $d_{1k} = -\frac{2}{n+1}\alpha_k\bar{S}_1$

$$d_{K1} = -\frac{1}{n+1}\alpha_1\bar{S}_k = -\frac{1}{n+1}\alpha_1 \times 2\frac{\alpha_k}{\alpha_1}\bar{S}_1 = -\frac{2}{n+1}\alpha_k\bar{S}_1 = d_{1k}$$

Nous avons donc l'expression de D, avec α_j représentant μ_{2j-2} :

d'où $\boxed{\underline{C} = DM^T\underline{B}}$

Ainsi, à ce stade, les C_{2i} sont calculables de façon analytique simple. Les C_{2i} étant déterminés, le passage à $\theta(\rho)$ se fait simplement, et le problème est résolu.

Terminons maintenant la formulation des calculs :

Posons $E = [e_{ij}] = DM^T$

E sera de dimension $(\ell+1) \times (n+2)$, et sera donné par les expressions :

$$\begin{cases} e_{i1} = \sum_{k=1}^{\ell+1} d_{ik}\,\mu_{2k-2} \\ e_{ij} = \sum_{k=1}^{\ell+1} d_{ik}\,T_{2k-2}(\rho_{j-1}) \end{cases} \quad \begin{matrix} \forall i = 1,2\ldots\ell+1 \\ \forall j = 2,3\ldots n+2 \end{matrix}$$

Les e_{ij} seront déterminés une fois pour toutes, car ils ne dépendent pas de la position axiale.

Enfin, soit $\underline{B}^T = [b_1\ b_2 \ldots b_{n+2}]$

avec $b_1 = Bi\theta_w$ et $b_j = -\frac{t(\rho_{j-1})}{\Delta y}$ pour $j = 2,3\ldots n+2$

Nous aurons : $$\boxed{C_{2k} = \sum_{j=1}^{n+2} e_{k+1,j} b_j \qquad \text{pour } k = 0,1\ldots\ell}$$

Repassons à θ :

$$\boxed{\theta(\rho_i) = \sum_{j=0}^{\ell} C_{2j} \underbrace{\sum_{j=0}^{k} a_{2j}^{2k} \rho_i^{2j}}_{\phi_{2k}^{i}} \qquad \forall i = 1,2\ldots n+1}$$

Les ϕ_{2k}^{i} seront également déterminés une fois pour toutes.

II-III-3-3 - <u>Synthèse et Conclusion</u>

Résumons maintenant les différentes phases de l'algorithme : A : <u>PHASE PREPARATOIRE</u>

(1) Calcul des coefficients des polynômes de Chebyshev (τ_{2k}^{2i})

(2) Calcul des a_{2k}^{2i} par récurrence

(3) Calcul des μ_{2k}

(4) Calcul de : * $\bar{S}_1$, puis d_{11}, d_{1k}

* $\bar{S}_2$, puis d_{k1}, d_{kk}, d_{kp}

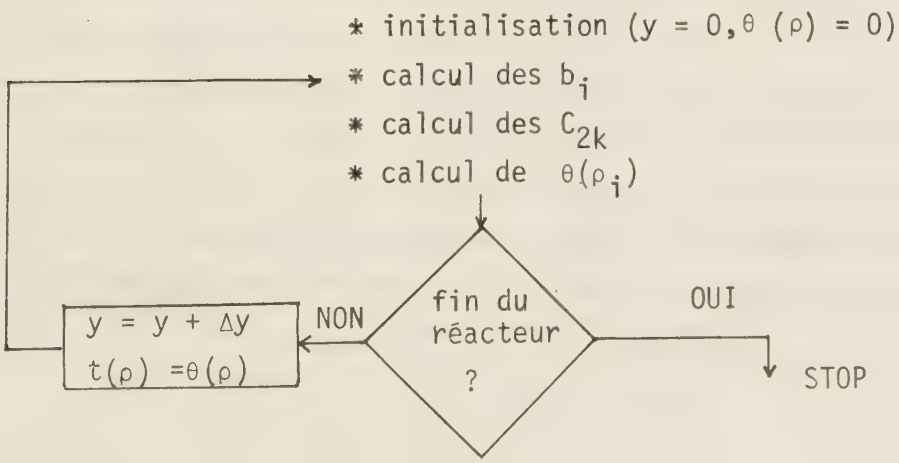
(5) Calcul des ρ_i

(6) Calcul des $T_{2k}(\rho_i)$

(7) Calcul des ϕ_{2k}^{i}

(8) Calcul des e_{ij}

B : <u>PARTIE ITERATIVE DE L'ALGORITHME</u>



Nous pouvons donc constater sur ce schéma que presque tous les calculs décrits précédemment sont concentrés dans la phase A . La partie itérative, c'est-à-dire le calcul des température radiales en chaque point de

l'axe ne nécessite que quelques opérations ; la sortie des résultats se fait donc à une cadence extrêmement rapide ; d'autre part, on constate que, même dans la phase préparatoire, les calculs sont simples : formules récurrentes, sommes de produits, etc... Cette partie prend donc également un temps très court, ce qui conduit à une faible durée totale de calcul ; ajoutons à cela que le pas Δy doit être assez grand, de façon à ce que la température de paroi, θ_W, intervienne significativement dans l'algorithme. Tout ceci conduit à une méthode très rapide, avec des résultats identiques à ceux des autres procédures.

II-IV - EXAMEN DES RESULTATS - COMPARAISON DES METHODES DE SIMULATION -

Nous avons donc pu, grâce à la collaboration de la Sté ANTAR, disposer d'un certain nombre d'essais et de résultats expérimentaux qui ont permis de comparer simulation et processus réels.

Toutes les données *"matérielles"* ont été fournies par la Sté ANTAR, et les paramètres thermiques et physiques (Bi, α) ont été obtenus dans la littérature |13||23| . N'ayant que deux paramètres à faire intervenir dans le modèle, il n'a pas été nécessaire d'effectuer une identification ; dans le cas du pseudo-pilote, les paramètres calculés n'ont pas eu à être ajustés ; dans le cas du pilote semi-industriel, nous les avons légèrement retouchés, d'après une expérience donnée, de façon à augmenter la crédibilité des simulations ultérieures.

Nous présenterons dans les pages suivantes quelques-uns des résultats obtenus, en simulation et sur processus réel. Auparavant, puisque nous avons profité de la simplicité du modèle pour tester quelques techniques de simulation numérique, nous allons revenir un peu sur ces méthodes, et en présenter un tableau comparatif. Les aspect qui nous intéressent sont : le temps de calcul, la difficulté de mise en oeuvre, la précision, l'intérêt théorique, et l'intérêt pratique de chaque procédure. Nous avons adjoint aux 3 méthodes décrites précédemment celles que nous avons citées sans les utiliser ici, mais dont nous connaissons néanmoins les performances habituelles.

METHODES	MISE EN OEUVRE	PRECISION	INTERÊT PRATIQUE	INTERÊT THEORIQUE	TEMPS DE CALCUL
Utilisation de la solution analytique.	Nécessite la tabulation des fonctions de Bessel et la résolution d'équations transcendantes (cf. IIIème partie)	Théoriquement excellente. Indépendante du pas de discrétisation, mais liée à l'ordre de troncation.	Douteux, dans ce cas simple.	Résultat exact et rigoureux.	Très petit, une fois calculées les fonctions de Bessel.
Discrétisation axiale + Runge Kutta avec tir	- Runge-Kutta:simple - Choix d'une méthode de tir efficace	Vraisemblablement assez bonne, si convergence.	Discutable : il vaut toujours mieux ne pas utiliser de méthodes de tir.	Nul	Peut être assez long
Discrétisation axiale + Fonctions de Green	- Calcul numérique des fonctions de Green : délicat - Nécessite le calcul numérique d'intégrales définies.	Bonne si le programme est bien conçu (cf. IIIème partie).	Discutable également; il faut en effet une parfaite présentation des calculs, quelquefois difficile.	Assez intéressant (résultat sous forme intégrale le long du rayon)	Moyen
Discrétisation axiale et radiale.	Immédiate	Peut être bonne, mais dépend considérablement des pas de discrétisation (risques d'instabilités numériques)	Donne très facilement des résultats utilisables.	Nul	Très rapide
Discrétisation axiale et approximation cubique (ou parabolique)	Très simple	Bonne - Moins dépendante du pas que précédemment.	Intéressant dans ce cas, car la forme des courbes se prête très bien à une telle approximation.	Négligeable	Très rapide
Discrétisation axiale et approximation de degré quelconque, avec collocation orthogonale.	Etablissement de l'algorithme assez lourd. Programmation assez simple.	Bonne à condition de choisir un pas adéquat, sinon risque d'instabilité.	Indiscutable dans certains cas, peut-être moins justifié dans le cas traité ici.	Indiscutable (solution radiale décomposée sur une base de polynômes, dont les coefficients sont exactement calculables)	Rapide

Nous pouvons ajouter à ce tableau une remarque concernant l'originalité que nous avons apportée dans la dernière méthode ; en effet il nous semble que cette utilisation des polynômes de Chebyshev, non pas comme base de décomposition mais comme dernière étape de mise en forme du système ; peut-être étendue à des équations différentielles plus complexes ou même à des systèmes différentiels. Nous justifions surtout son emploi dans le cas de problèmes à valeurs limites en deux points.

Les résultats exposés à présent ont été obtenus indifféremment par les diverses méthodes que nous avons utilisées :

1°) PSEUDO-PILOTE DE LABORATOIRE

Figure II-IV-1 : comparaison des profils radiaux obtenus par calcul et par expérience, à 104 cm de l'entrée. L'erreur maximale est de 13°C pour 460°.

Figure II-IV-2 : 3 profils axiaux calculés (entrée à 400°C ; paroi à 485°C)

Figure II-IV-3 : 3 profils axiaux calculés (entrée à 20°C ; paroi à 485°C)

Figure II-IV-4 : 5 profils radiaux calculés (entrée à 20°C ; paroi à 485°C)

2°) PILOTE SEMI-INDUSTRIEL

Figure II-IV-5 : comparaison de profils axiaux au centre, calculés et expérimentaux.

Figure II-IV-6 : comparaison de profils radiaux correspondant aux cas précédents.
Dans ces deux groupes de courbes, la température de paroi était variable le long du réacteur (environ 10 % de variation totale)

Figure II-IV-7 : prévision du comportement thermique du processus , pour trois diamètres différents du réacteur ; ces essais, effectués à la demande de la Sté ANTAR, ne peuvent être faits qu'en simulation, et peuvent éventuellement intervenir dans le choix ultérieur du matériel.

PSEUDO PILOTE

PROFIL RADIAL A 104 cm
température entrée air = 400°C

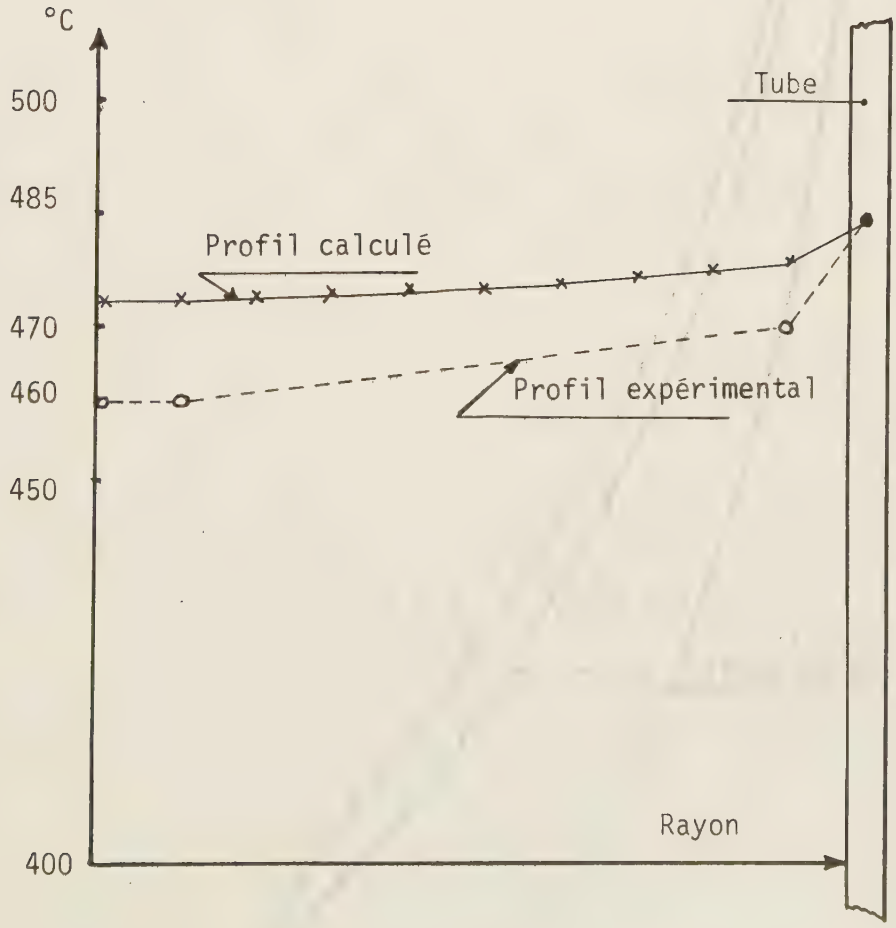


Fig. II-IV-1

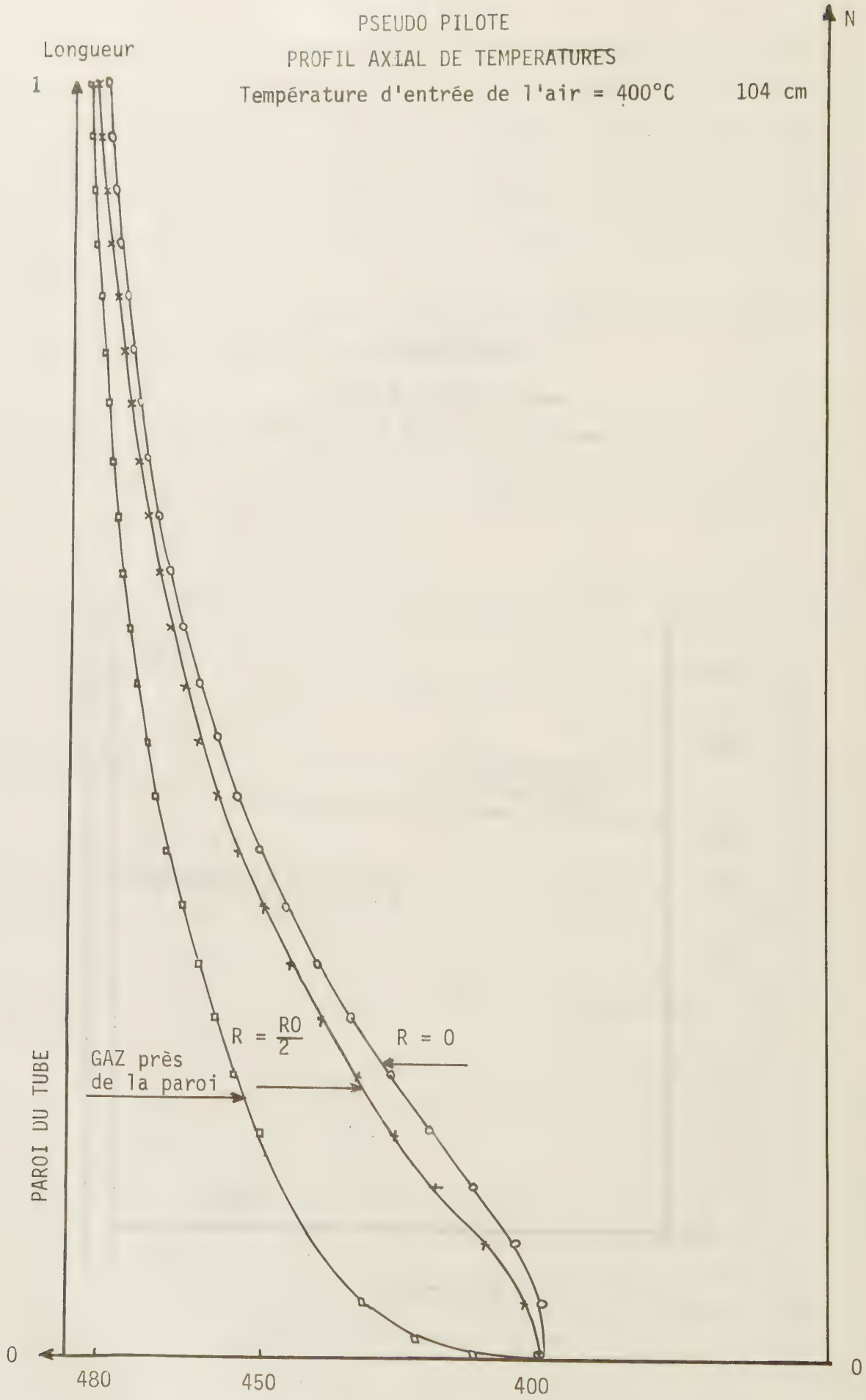

PSEUDO PILOTE
PROFIL AXIAL DE TEMPERATURES
Température d'entrée de l'air = 400°C
104 cm
Longueur
1
N
0
0
480
450
400
PAROI DU TUBE
GAZ près
de la paroi
R = RO/2
R = 0

Fig. II-IV-2

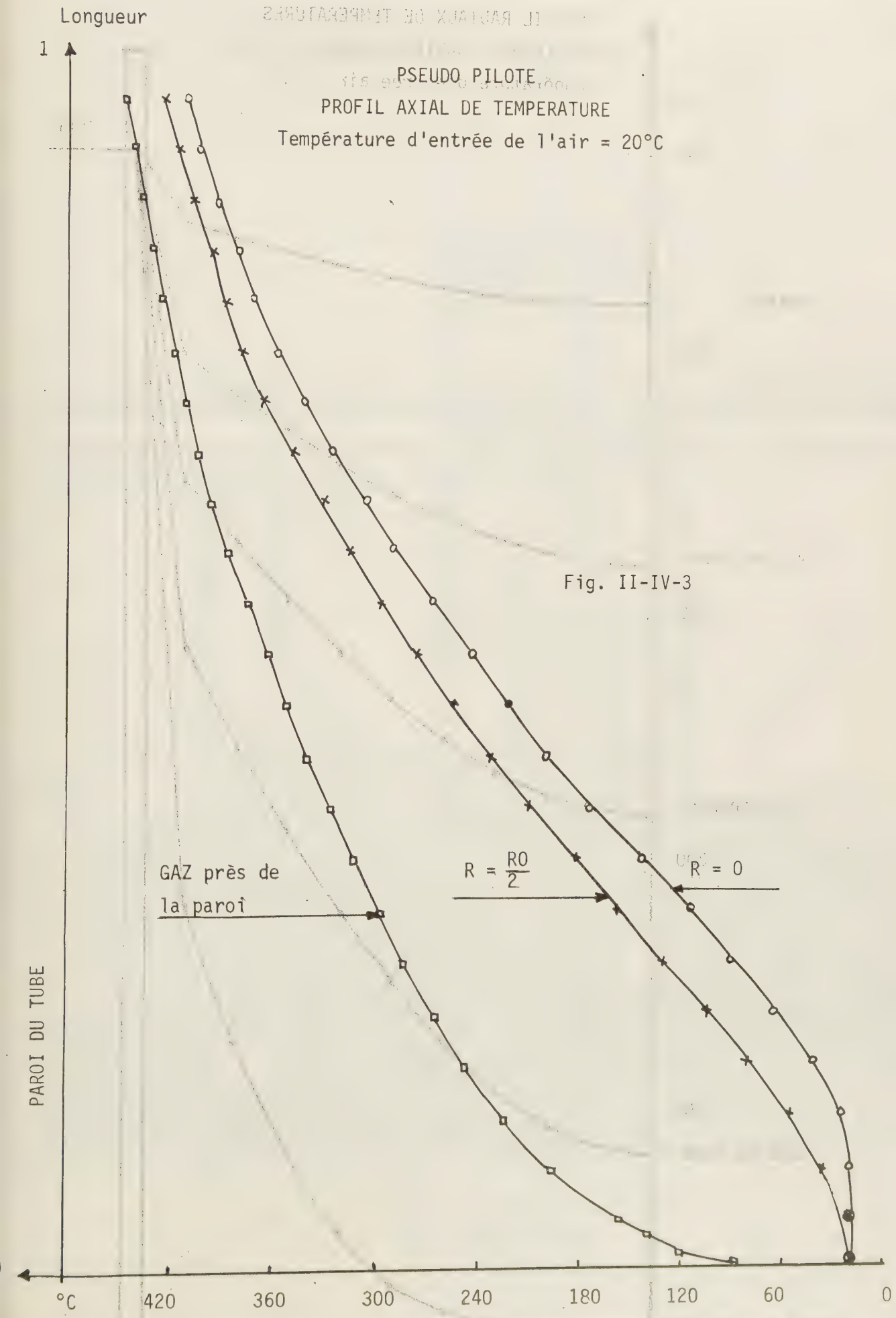
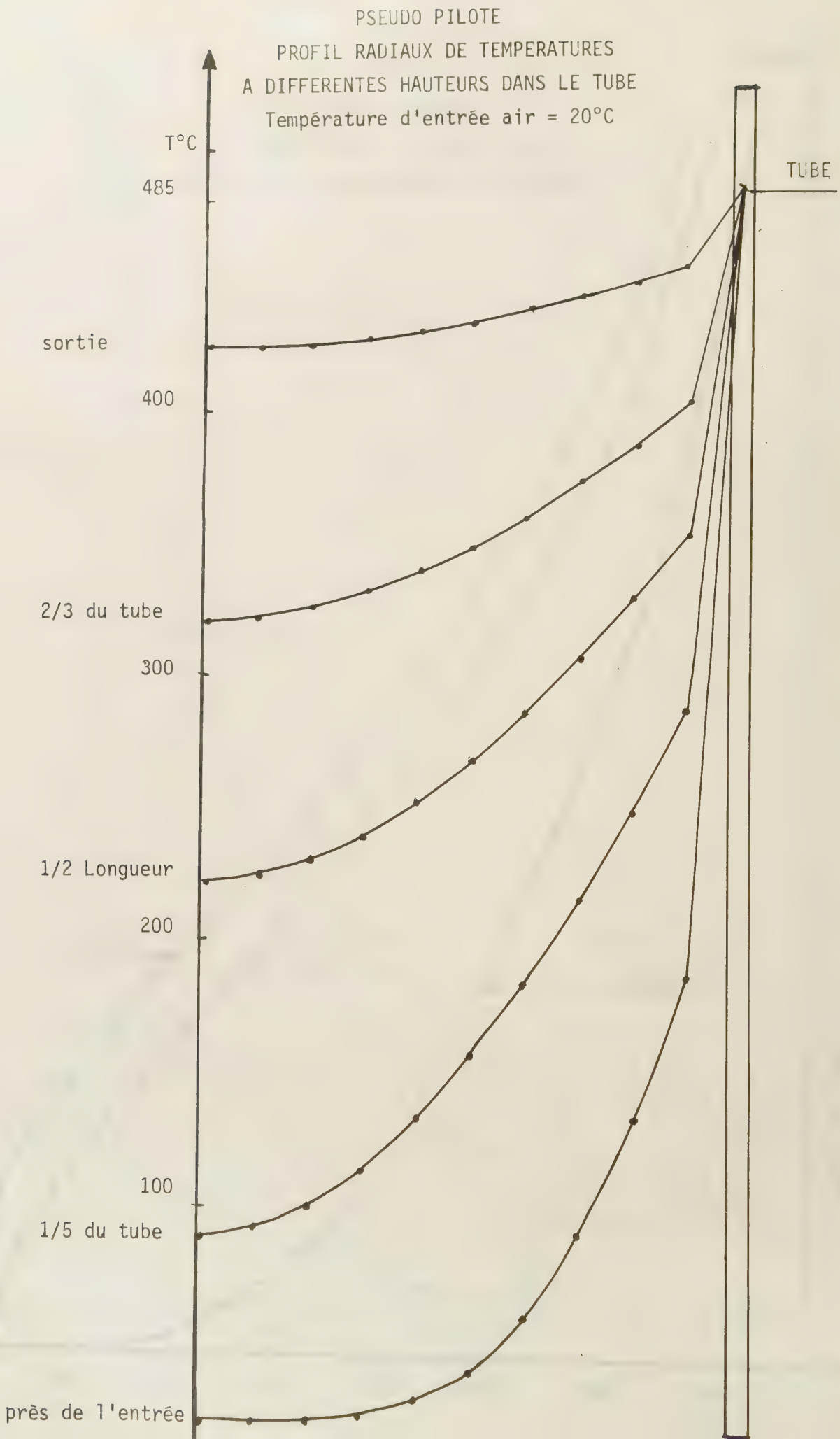
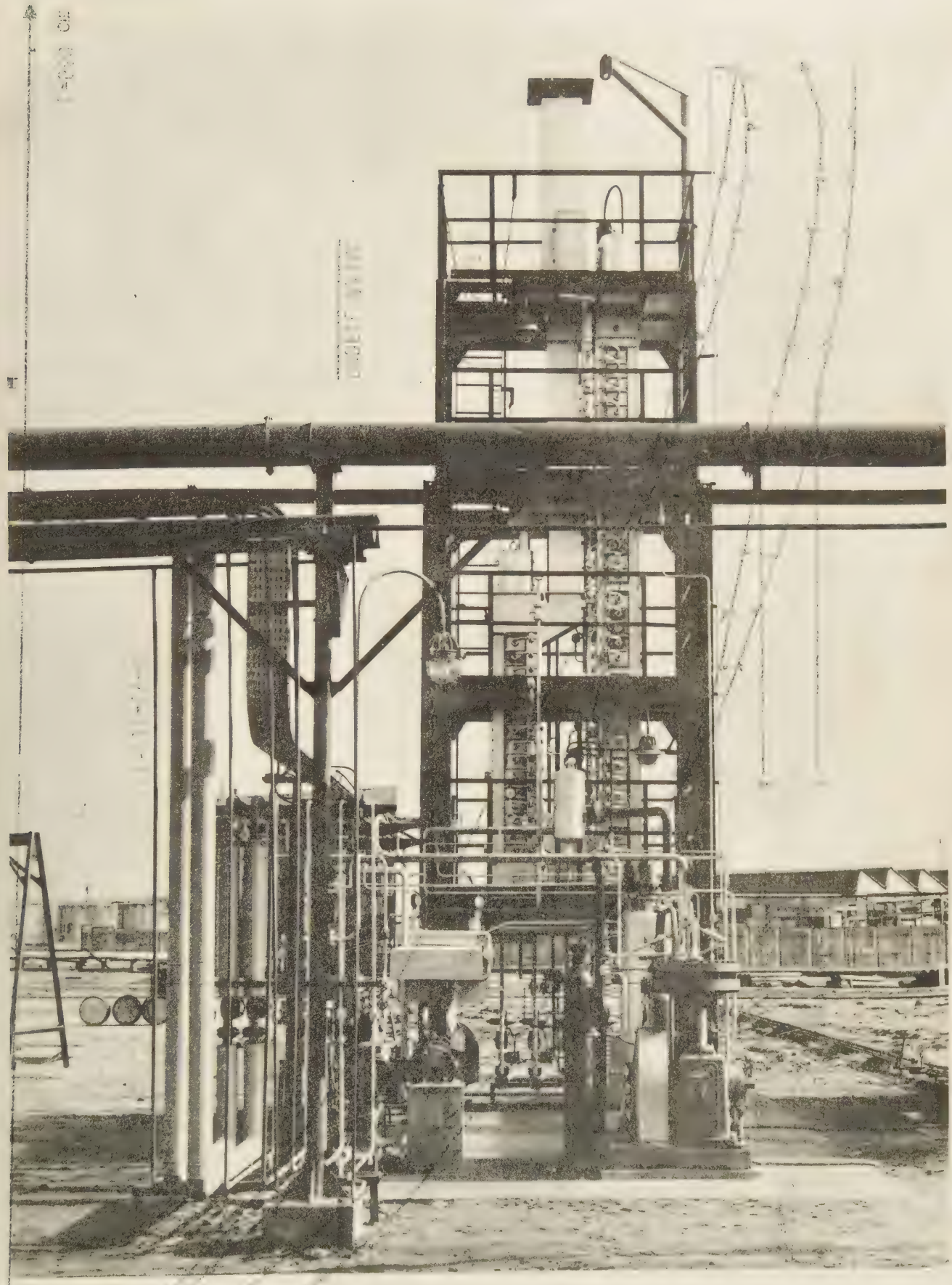

Longueur
1
PSEUDO PILOTE
PROFIL AXIAL DE TEMPERATURE
Température d'entrée de l'air = 20°C
GAZ près de
la paroi
R = RO/2
R = 0
PAROI DU TUBE
°C
420
360
300
240
180
120
60
0

Fig. II-IV-3


PSEUDO PILOTE
PROFIL RADIAUX DE TEMPERATURES
A DIFFERENTES HAUTEURS DANS LE TUBE
Température d'entrée air = 20°C
T°C
485
400
300
200
100
TUBE
sortie
2/3 du tube
1/2 Longueur
1/5 du tube
près de l'entrée



Unité pilote de reforming catalytique
Raffinerie ANTAR-DONGES

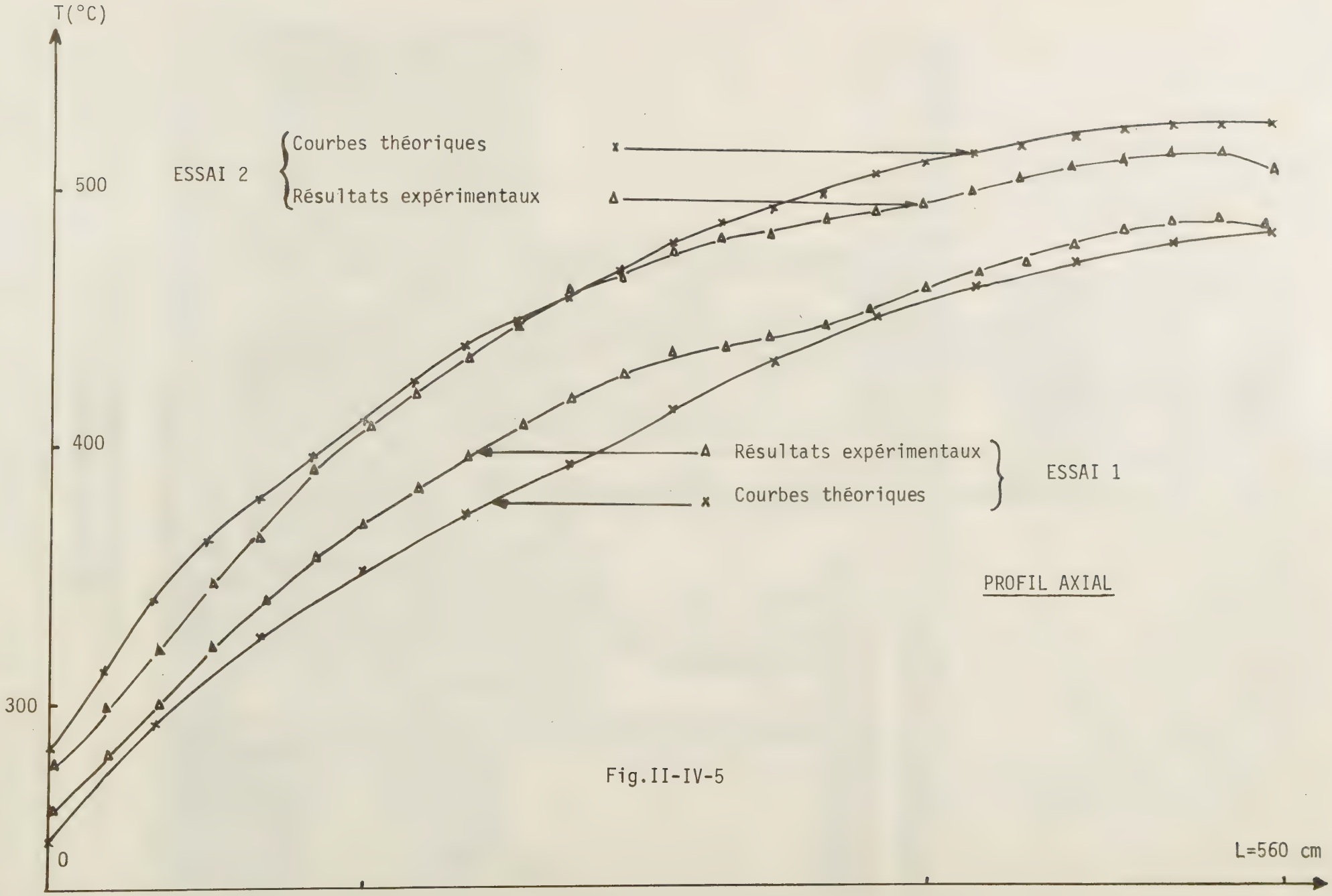

T(°C)
500
400
300
0
L=560 cm
ESSAI 2
Courbes théoriques
Résultats expérimentaux
Résultats expérimentaux
Courbes théoriques
ESSAI 1
PROFIL AXIAL

Fig.II-IV-5

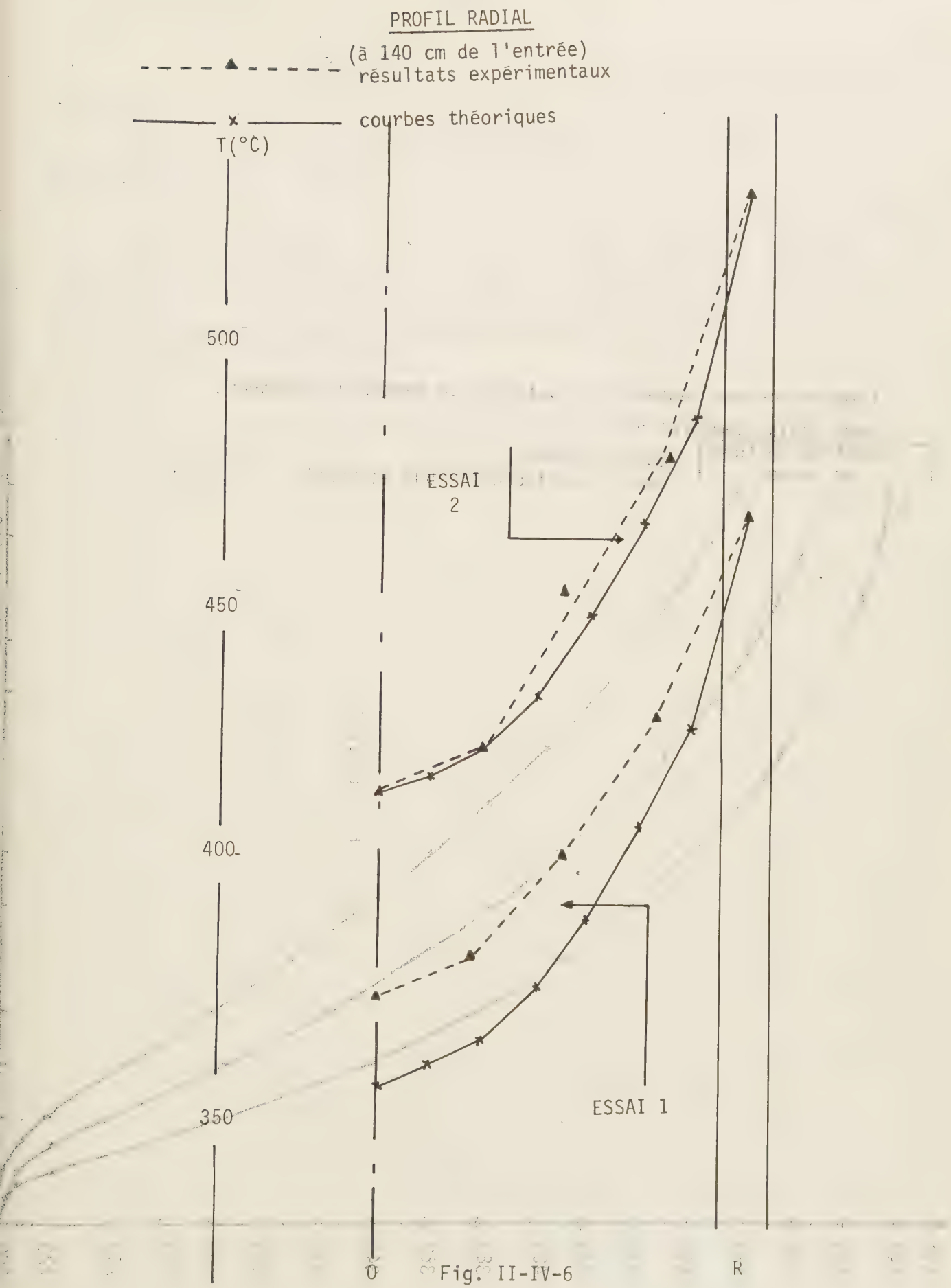

PROFIL RADIAL
(à 140 cm de l'entrée)
résultats expérimentaux
courbes théoriques
T(°C)
500
450
400
350
ESSAI 2
ESSAI 1
0
R

Fig. II-IV-6

Comparaison des températures axiales, au centre du réacteur, pour trois diamètres de tube.

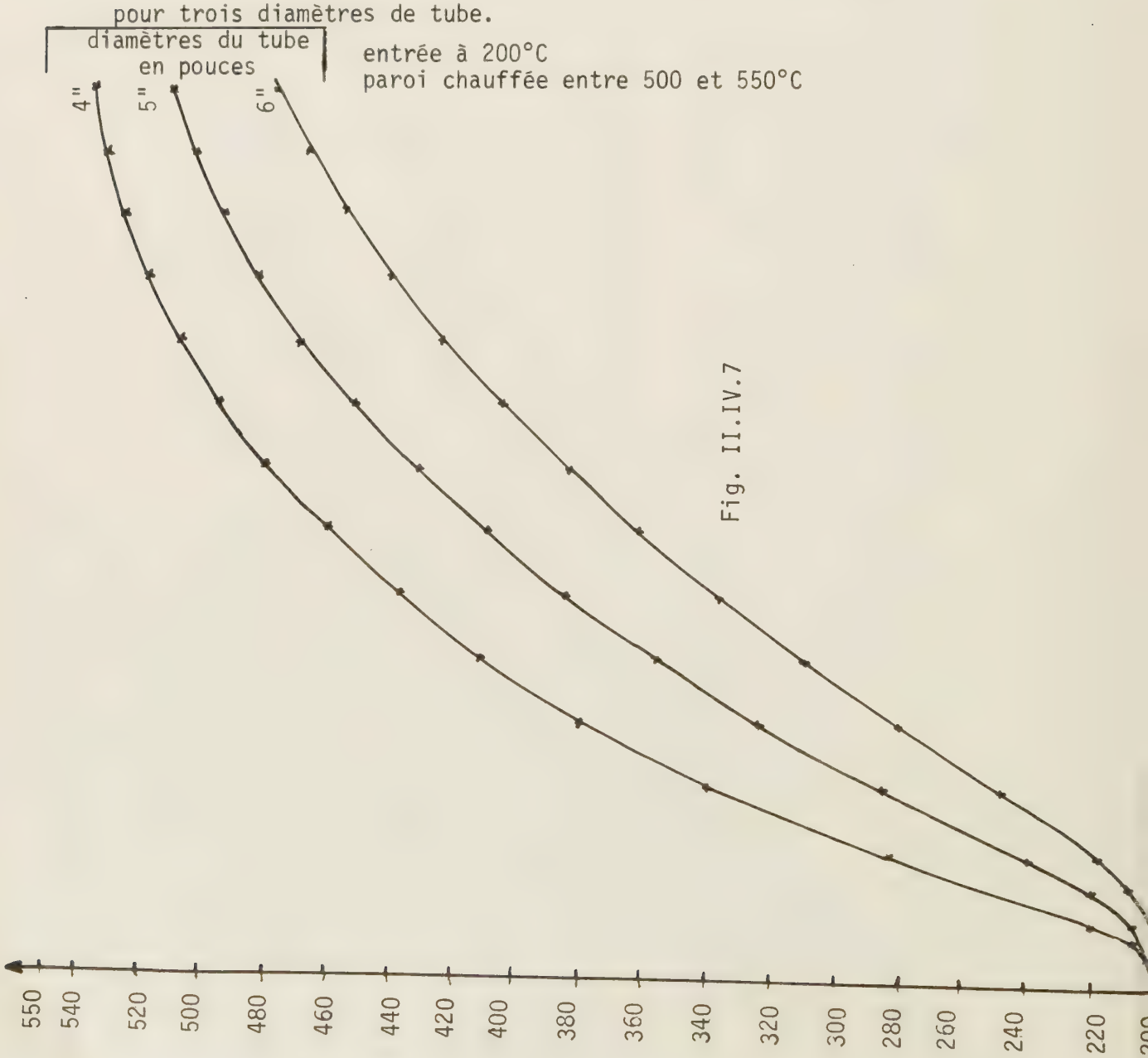


Fig. II.IV.7

En conclusion, il apparaît que les simulations effectuées ont été accueillies avec un intérêt certain par la Sté ANTAR : elles ont permis en effet de prévoir certains comportements thermiques des processus, en évitant des expériences assez coûteuses, et parfois longues.

Pour notre part, malgré la simplicité du modèle retenu, elles nous ont permis de faire le point sur quelques types de méthodes utilisées dans le cas d'équations aux dérivées partielles, et de proposer un algorithme de simulation par polynômes orthogonaux qui peut certainement s'adapter à d'autres types de modèles physiques.

Il nous a donc semblé opportun de rassembler ces résultats, avant de décrire en détail une méthode de simulation beaucoup plus évoluée, appliquée à un processus complexe.

TROISIEME PARTIE

SIMULATION NUMERIQUE D'UN REACTEUR TUBULAIRE A STOECHIOMETRIE UNIQUE

Le modèle mathématique de connaissance associé au réacteur a été établi dans le premier chapitre. Nous développons au cours de cette partie un algorithme de simulation du réacteur.

Rappelons que le modèle mathématique est constitué d'un système d'équations aux dérivées partielles du second ordre, couplées par un terme non linéaire avec conditions aux deux bouts.

Parmi les méthodes classiques de traitement des E.D.P., citons :

- la méthode des différences finies avec ou sans relaxation |20||10| |27|
- la décomposition sur une base de fonctions orthogonales |1| |6|
- la simulation hybride |26| |27|.

En raison de la nature du problème à traiter, la mise en oeuvre d'une simulation hybride serait difficile surtout si l'on souhaite conserver une certaine généralité au problème. La première méthode s'écarte de tout traitement formel mais nécessite toutefois la mise au point de programmes particuliers destinés à faciliter la résolution numérique et à améliorer la convergence |10|.

La procédure que nous utilisons s'apparente à la deuxième des méthodes citées en raison de l'analogie des résultats. Toutefois, le choix de la base des fonctions propres de décomposition de la solution utilise largement la nature particulière du modèle mathématique, en vue d'alléger le traitement des équations transformées.

Ce troisième chapitre décrit en détail la procédure de transformation intégrale utilisée ici pour la simulation d'un réacteur chimique.

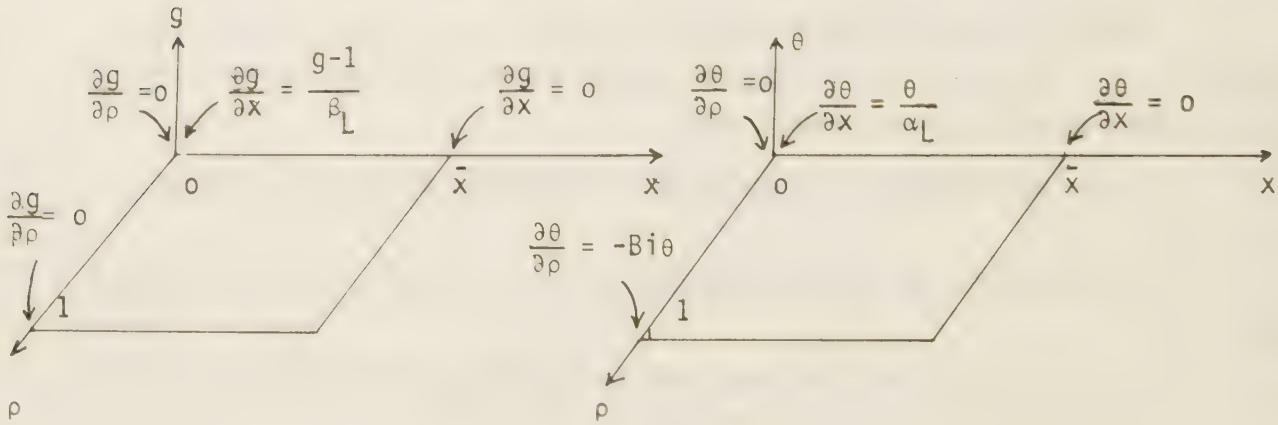
III.I - PROCEDURE DE TRANSFORMATION INTEGRALE

La transformation d'expressions à l'aide d'opérateurs intégraux est un artifice fréquemment utilisé en automatique (Laplace, Fourier, par exemple). La transformation que nous utiliserons est quelquefois appelée transformation de Bessel, en raison des fonctions formant la base obtenue. Cependant, il faut remarquer que le type de transformation que nous ferons subir au système n'est

pas arbitraire et dépend uniquement des caractéristiques mathématiques de celui-ci.

Rappelons que nous traitons un modèle de réacteur du type $A \rightleftarrows B$, représenté par le système :

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial g}{\partial \rho} + \dfrac{\partial^2 g}{\partial \rho^2} + \left(\dfrac{\beta_L}{\beta_r}\right)\dfrac{\partial^2 g}{\partial x^2} - \left(\dfrac{1}{\beta_r}\right)\dfrac{\partial g}{\partial x} = \left(\dfrac{1}{\beta_r}\right)\Psi(g,\theta) & (3101) \\[2ex] \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} + \dfrac{\partial^2 \theta}{\partial \rho^2} + \left(\dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\right)\dfrac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \left(\dfrac{1}{\alpha_1}\right)\dfrac{\partial \theta}{\partial x} = \left(\dfrac{A}{\alpha_r}\right)\Psi(g,\theta) & (3102) \end{cases}$$

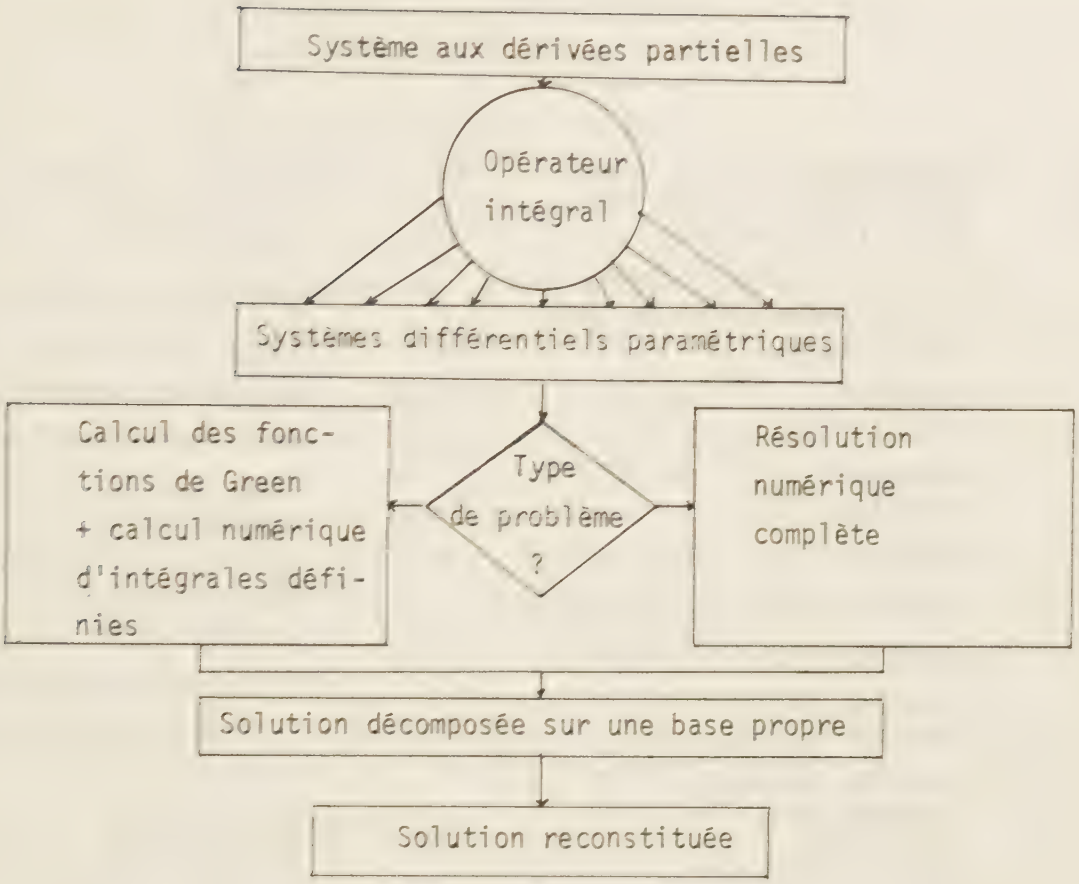


$\dfrac{\partial g}{\partial \rho} = 0$	pour $\rho = 0$	(3103)	$\dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0$	pour $\rho = 0$	(3107)
$\dfrac{\partial g}{\partial \rho} = 0$	pour $\rho = 1$	(3104)	$\dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = -Bi\ \theta$	pour $\rho = 1$	(3108)
$\dfrac{\partial g}{\partial x} = \dfrac{g-1}{\beta_L}$	pour $x = 0$	(3105)	$\dfrac{\partial \theta}{\partial x} = \dfrac{\theta}{\alpha_L}$	pour $x = 0$	(3109)
$\dfrac{\partial g}{\partial x} = 0$	pour $x = \bar{x}$	(3106)	$\dfrac{\partial \theta}{\partial x} = 0$	pour $x = \bar{x}$	(3110)

Nous n'avons que deux produits de concentrations respectives adimensionnelles g et (1-g), et le coefficient α_1 affecté à A vaut (-1).

Avant d'entrer dans les détails de calcul, nous allons exposer brièvement les grandes lignes de la méthode, et définir les hypothèses nécessaires.

Le principe de résolution consiste à transformer le système aux dérivées partielles en un grand nombre de systèmes différentiels, à approximer les seconds membres par des polynômes, à résoudre les systèmes obtenus, et à reconstituer les solutions à l'aide de leurs décompositions sur une base convenable de fonctions propres. Le diagramme ci-après symbolise la démarche à effectuer :



Les hypothèses nécessitées par l'algorithme sont les suivantes |1|.

* Les fonctions g et θ appartiennent à l'ensemble des fonctions de carré sommable dans le domaine choisi ($[0,1] \times [0,1]$)

* Les fonctions g et θ peuvent être respectivement décomposées sur deux bases de fonctions propres, ces dernières étant orthogonales avec un certain poids, et les valeurs propres attachées aux fonctions propres formant une suite infinie, croissante, discrète de nombres positifs.

NOTATIONS

A = constante physique intervenant dans la modélisation (1ère partie)

$a_j(x)$ = coefficients de l'approximation polynomiale du terme non-linéaire

$\hat{a}_n(x)$ = composante $n^{ième}$ de la solution $g(x,\rho)$

$\hat{b}_m(x)$ = composante $m^{ième}$ de la solution $\theta(x,\rho)$

Bi = nombre de Biot (1ère partie)

$g(x,\rho)$ = concentration sans dimension

$\bar{g}_n(x)$ = concentration transformée

$G_n(x,\xi)$ = fonction de Green n° "n" (concentration)

$H_m(x,\xi)$ = fonction de Green n° "m" (température)

$\overset{\circ}{I}_{j+1}(x)$ = $\int_0^x x^{j+1} J_0(x)dx$

$J_p(x)$ = fonction de Bessel d'ordre p

$K(n,\rho)$ = noyau ("Kernel") d'un opérateur intégral (concentration)

$\hat{K}_n(\rho)$ = $J_0(\lambda_n\rho)$: composante $n^{ième}$ de la base propre (concentration)

$L(m,\rho)$ = noyau de l'opérateur température

$\hat{L}(m,\rho)$ = $J_0(\nu_m\rho)$ composante $m^{ième}$ de la base propre (température)

m = indice des valeurs propres (température)

n = indice des valeurs propres (concentration)

Q_0^{j+1} et Q_1^{j+1} = polynômes permettant le calcul analytique de $\overset{\circ}{I}_{j+1}$

r_1, r_2 = constantes intervenant dans les fonctions $G_n(x,\xi)$

α_L,α_r β_L,β_r = constantes intervenant dans la modélisation (1ère partie)

δ_{1n} = symbôle de Kronecker

$\delta(u)$ = impulsion de Dirac

$\theta(x,\rho)$ = température adimensionnelle

$\bar{\theta}_m(x)$ = température transformée

λ,λ_n = valeur propre, d'ordre n (concentration)

Λ^m = opérateur différentiel linéaire numéro n (concentration)

μ_n = coefficient normalisant

$$= \frac{2}{J_0^2(\lambda_n)} \text{(concentration)}$$

ν,ν_m = valeur propre, d'ordre m (température)

ξ = variable axiale de convolution dans les fonctions de Green

ρ = variable radiale

σ_m = coefficient normalisant en température

$$= \frac{2}{\left[1+\frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_0^2(\nu_m)}$$

$\bar{\Phi}_m$ = transformée du second membre de la deuxième équation :

$$= \frac{A}{\alpha_r}\int_0^1 \Psi\, L\, d\rho$$

$\tilde{\bar{\Phi}}$ = approximation polynômiale de $\bar{\Phi}_m$

$\Psi(g,\theta)$ = terme de création non linéaire

$\tilde{\Psi}(x,\rho)$ = approximation polynômiale de Ψ

$\bar{\Psi}(g,\theta)$ = transformée de ψ

$$= \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \Psi\, K\, d\rho$$

S_1, S_2 = constantes intervenant dans les fonctions $H_m(x,\xi)$

W^m = opérateur différentiel linéaire numéro m (température)

x = variable axiale

$\bar{x}$ = longueur de réacteur

$y_n(x)$ = $\bar{g}_n(x)-\delta_{1n}$

$\bar{\tilde{\Psi}}$ = transformée de l'approximation de Ψ

ω_m = constante intervenant dans $H_m(x,\xi)$

Ω_n = constante similaire à ω_m dans $G_n(x,\xi)$

III.I.1 - Choix et justification des opérateurs intégraux |1|

Les équations (3101) et (3102) ayant des structures analogues, la procédure d'obtention de l'opérateur est unique ; seules les conditions aux limites introduisent des modifications.

Soit $K(\rho,n)$ le noyau d'un opérateur intégral, fonction de la variable radiale ρ et d'un paramètre indicé par le nombre n.

Posons : $$\bar{g}(x,n) = \int_0^1 g(x,\rho)\ K(\rho,n)\ d\rho$$

$$\bar{\Psi}(x,n) = \frac{1}{\beta r}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\ K(\rho,n)\ d\rho$$

L'équation (3101) devient :

$$\int_0^1 \frac{1}{\rho}\frac{\partial g}{\partial \rho} K\, d\rho + \int_0^1 \frac{\partial^2 g}{\partial \rho^2} K\, d\rho + \frac{\beta_L}{\beta_r}\int_0^1 \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} K\, d\rho - \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \frac{\partial g}{\partial x} K\, d\rho = \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \Psi(g,\theta) K\, d\rho$$

$$\underbrace{\int_0^1 \frac{1}{\rho}\frac{\partial g}{\partial \rho} K\, d\rho + \int_0^1 \frac{\partial^2 g}{\partial \rho^2} K\, d\rho}_{E} + \left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right)\frac{\partial^2 \bar{g}}{\partial x^2} - \left(\frac{1}{\beta_r}\right)\frac{\partial \bar{g}}{\partial x} = \bar{\Psi}(x,n) \qquad (3111)$$

Posons $E_1 = \int_0^1 \frac{\partial^2 g}{\partial \rho^2} K\, d\rho$ et $E_2 = \int_0^1 \frac{1}{\rho}\frac{\partial g}{\partial \rho} K\, d\rho$

En intégrant par parties, nous obtenons respectivement :

$$E_1 = \left[K \frac{\partial g}{\partial \rho}\right]_0^1 - \int_0^1 \left(\frac{\partial g}{\partial \rho}\right)\left(\frac{\partial K}{\partial \rho}\right) d\rho$$

$$E_2 = \left[\frac{gK}{\rho}\right]_0^1 - \int_0^1 \left(-\frac{1}{\rho^2} gK + \frac{1}{\rho} g \frac{\partial K}{\partial \rho}\right) d\rho$$

$$E = \left[\frac{Kg}{\rho} + K\frac{\partial g}{\partial \rho}\right]_0^1 - \int_0^1 \left(-\frac{1}{\rho^2} gK + \frac{1}{\rho} g \frac{\partial K}{\partial \rho}\right) d\rho - \int_0^1 \left(\frac{\partial g}{\partial \rho}\right)\left(\frac{\partial K}{\partial \rho}\right) d\rho$$

En posant $E_3 = \int_0^1 \left(\frac{\partial g}{\partial \rho}\right)\left(\frac{\partial K}{\partial \rho}\right) d\rho$ et en intégrant par parties, nous obtenons :

$$E = \underbrace{\left[\frac{Kg}{\rho} + K\frac{\partial g}{\partial \rho} - g\frac{\partial K}{\partial \rho}\right]_0^1}_{E_4} + \int_0^1 g\left[\frac{K}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial K}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 K}{\partial \rho^2}\right] d\rho$$

Nous devons choisir $K(\rho,n)$ de telle sorte que (3111) devienne une équation différentielle ordinaire en $\bar{g}(x,n)/x$. Posons pour cela :

$$\frac{K}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial K}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 K}{\partial \rho^2} = -\lambda^2 K \qquad (3112)$$

alors :

$$\int_0^1 g\left[\frac{K}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial K}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 K}{\partial \rho^2}\right] d\rho = \int_0^1 g(-\lambda^2) K\, d\rho = -\lambda^2 \bar{g}(x,n)$$

Nous recherchons une solution de l'équation (3112) du type $K(\rho,n) = \phi(\rho,n)\, \hat{K}(\rho,n)$

$$\frac{\phi\hat{K}}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\left[\frac{\partial \phi}{\partial \rho}\hat{K} + \phi\frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho}\right] + \hat{K}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \rho^2} + 2\frac{\partial \phi}{\partial \rho}\frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho} + \phi\frac{\partial^2 \hat{K}}{\partial \rho^2} = -\lambda^2 \phi \hat{K}$$

$$\phi \frac{\partial^2 \hat{K}}{\partial \rho^2} + \left[2 \frac{\partial \phi}{\partial \rho} - \frac{\phi}{\rho}\right] \frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho} + \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial \rho} + \frac{\phi}{\rho^2}\right] \hat{K} = - \lambda^2 \phi \hat{K}$$

Pour obtenir une équation de Bessel d'ordre zéro en $\hat{K}$, nous allons choisir ϕ de telle sorte que :

$$\text{et} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial^2 \phi}{\partial \rho^2} - \dfrac{1}{\rho} \dfrac{\partial \phi}{\partial \rho} + \dfrac{\phi}{\rho^2} = 0 \\[2ex] \dfrac{2 \partial \phi}{\partial \rho} - \dfrac{\phi}{\rho} = \mu \end{cases}$$

Nous obtenons alors $\phi = \mu \rho$

D'où la forme complète de $K(\rho,n)$

$K(\rho,n) = \mu \rho \hat{K}(\rho,n)$ où $\hat{K}(\rho,n)$ est solution de

$$\rho \frac{\partial^2 \hat{K}}{\partial \rho^2} + \frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho} + \lambda^2 \rho \hat{K} = 0 \qquad (3113)$$

L'équation (3113) est une équation de Bessel dont l'intégrale générale est connue (2). Nous allons imposer les deux conditions aux limites sur (3113) de façon à éliminer le terme E_4 gênant. C'est à ce niveau que les procédures de traitement pour les équations (3101) et (3102) diffèrent.

III.I.1.1 - <u>Cas de l'équation (3101)</u>

$$E_4 = \left[\frac{Kg}{\rho} + K \frac{\partial g}{\partial \rho} - g \frac{\partial K}{\partial \rho}\right]_0^1 \text{ avec } \frac{\partial g}{\partial \rho} = 0 \text{ pour } \rho = 0 \text{ et } \rho = 1$$

$$E_4 = \left[\mu \hat{K} g + \mu \rho \hat{K} \frac{\partial g}{\partial \rho} - \mu g \hat{K} - \mu g \rho \frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho}\right]_0^1 = \left[\mu \rho \left(\hat{K} \frac{\partial g}{\partial \rho} - g \frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho}\right)\right]_0^1 = 0$$

Nous prendrons pour conditions :

$$\frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho} = 0 \text{ pour } \rho = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \hat{K}}{\partial \rho} = 0 \text{ pour } \rho = 1$$

A la fin de cette étape, nous pouvons dire que l'équation aux dérivées partielles (3101) sera transformée en équation différentielle ordinaire :

$$\left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \frac{d^2\bar{g}(x,n)}{dx^2} - \left(\frac{1}{\beta_r}\right) \frac{d\bar{g}(x,n)}{dx} - \lambda^2\bar{g}(x,n) = \bar{\Psi}(x,n) \quad \text{où}$$

$$\bar{g}(x,n) = \int_0^1 g(\rho,x)\ K(\rho,n)\ d\rho \quad \text{et} \quad \bar{\Psi}(x,n) = \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\ K(\rho,n)d\rho$$

Le noyau de l'opérateur intégral $K(\rho,n)$ est tel que $K(\rho,n) = \mu(n)\ \rho\ \hat{K}(\rho,n)$ où $\hat{K}(\rho,n)$ est solution de l'équation de Bessel :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2\hat{K}}{\partial\rho^2} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial\hat{K}}{\partial\rho} + \lambda^2\hat{K} = 0 \\ \dfrac{\partial\hat{K}}{\partial\rho} = 0 \text{ pour } \rho = 0 \\ \dfrac{\partial\hat{K}}{\partial\rho} = 0 \text{ pour } \rho = 1 \end{cases}$$

Le paramètre λ n'a pas été déterminé à ce stade. Si nous posons $r = \lambda\rho$, l'équation de Bessel devient :

$$\lambda^2 \left[\frac{d^2\hat{K}}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\hat{K}}{dr} + \hat{K}\right] = 0$$

dont la solution connue est :

$$\hat{K} = C_1\ J_o(\lambda\rho) + C_2\ N_o(\lambda\rho)$$

J_o et N_o étant respectivement les fonctions de Bessel et de Neuman d'ordre zéro.

Identifions C_1 et C_2 sachant que :

$N_o(\lambda\rho) \to \infty$ pour $\rho \to 0$, donc $C_2 = 0$, pour que $\hat{K}$ reste fini.

Il reste :

$\hat{K} = C_1\ J_o(\lambda\rho)$ qui doit satisfaire aux conditions aux limites

$\left.\dfrac{d\hat{K}}{d\rho}\right|_0 = -\lambda\ C_1\ J_1(\lambda\rho)\Big|_0 = 0$ relation qui est toujours vérifiée car $J_1(0) = 0$

$\left.\dfrac{d\hat{K}}{d\rho}\right|_1 = -\lambda\ C_1\ J_1(\lambda) = 0$

ce qui impose que λ soit solution de $J_1(\lambda) = 0$, soit $[\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_j, \ldots \lambda_n \ldots]$

A chaque valeur propre λ_n correspond une fonction propre $\hat{K}(\rho,n)$ notée $\hat{K}_n(\rho)$.

Le noyau propre $K_n(\rho) = \mu(n)\ \rho\ C_1(n)\ J_o(\lambda_n\rho)$ sera noté $K_n(\rho) = \mu_n\ \rho J_o(\lambda_n\rho)$ par fusion des constantes $\mu(n)\ C_1(n)$, avec $\hat{K}_n(\rho) = J_o(\lambda_n\rho)$

Etablissons l'orthogonalité des $\hat{K}_n(\rho)$ avec le poids ρ :

$$\int_0^1 \rho\ \hat{K}_n(\rho)\ \hat{K}_m(\rho)\ d\rho = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq m \\ C_n & \text{si } m = n \end{cases} \qquad (3114)$$

en effet : $\int_0^1 \rho\ J_o(\lambda_n\rho)\ J_o(\lambda_m\rho)\ d\rho = 0$ pour $n \neq m$

et si $n = m$ $\int_0^1 \rho\ J_o^2(\lambda_n\rho)\ d\rho = \frac{1}{2} J_o^2(\lambda_n)$ |1 - page 170|

La décomposition de $g(\rho,x)$ sur la base des fonctions propres $\hat{K}_n(\rho)$ s'écrit :

$$g(\rho,x) = \sum_{m=1}^{\infty} \hat{a}_m(x)\ \hat{K}_m(\rho)$$

Multiplions par $\rho\ \hat{K}_n(\rho)$ et intégrons sur [0,1] :

$$\int_0^1 g(\rho,x)\ \rho\ \hat{K}_n(\rho) d\rho = \sum_{m=1}^{\infty} \hat{a}_m(x) \int_0^1 \rho\ \hat{K}_m(\rho)\ \hat{K}_n(\rho)\ d\rho$$

$$= \hat{a}_n(x) \int_0^1 \rho\ \hat{K}_n^2(\rho)\ d\rho = \hat{a}_n(x)\ \frac{J_o^2(\lambda_n)}{2}$$

d'où : $$\hat{a}_n(x) = \frac{2}{J_o^2(\lambda_n)} \int_0^1 g(x,\rho)\ \rho\ \hat{K}_n(\rho)\ d\rho = \int_0^1 g(\rho,x)\ \frac{2\rho\hat{K}_n(\rho)}{J_o^2(\lambda_n)}\ d\rho$$

Si nous prenons $\mu_n = \frac{2}{J_o^2(\lambda_n)}$, $\hat{a}_n(x)$ s'écrit :

$$\hat{a}_n(x) = \int_0^1 \rho\ g(x,\rho)\ \mu_n\ \hat{K}_n(\rho) = \int_0^1 g(\rho,x)\ K_n(\rho)\ d\rho = \bar{g}_n(x)$$

D'où la transformation inverse :

$$\boxed{g(x,\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(x)\ \hat{K}_n(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(x)\ J_o(\lambda_n\rho)}$$

Nous pouvons maintenant rassembler les principales étapes de la simulation en concentration :

1°) Calculer le spectre $[\lambda_1, \lambda_2 \ldots\ \lambda_n \ldots]$ par résolution de l'équation $\lambda J_1(\lambda) = 0$.

2°) Pour chaque ρ donné et pour $i = 1,2\ldots n$:

- calculer $\hat{K}_i(\rho) = J_o(\lambda_i\rho)$
- intégrer l'équation différentielle :

$$\left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \frac{d^2 g_i(x)}{dx^2} - \left(\frac{1}{\beta_r}\right) \frac{d\bar{g}_i(x)}{dx} - \lambda_i^2\ \bar{g}_i(x) = \Psi_i(x) \qquad (3115)$$

3°) Effectuer la transformation inverse :

$$g(x,\rho) = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{g}_i(x)\, J_0(\lambda_i \rho) \tag{3116}$$

Il nous reste donc à intégrer l'équation (3115) ; mais elle dépend de la fonction θ par l'intermédiaire de l'expression non linéaire $\bar{\Psi}_i$. Nous allons donc préalablement appliquer à l'équation (3102) une transformation similaire à la précédente.

III.I.1.2 - Traitement de l'équation (3102)

Posons :

$$\bar{\theta}(x,m) = \int_0^1 \theta(x,\rho)\, L(\rho,m)\, d\rho \quad \text{et} \quad \bar{\Phi}(x,m) = \frac{A}{\alpha_r}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\, L(\rho,m)\, d\rho$$

Nous obtenons à partir de (3102) une infinité d'équations différentielles ordinaires du type :

$$\left(\frac{\alpha_L}{\alpha_r}\right) \frac{d^2\bar{\theta}(x,m)}{dx^2} - \frac{1}{\alpha_r}\frac{d\bar{\theta}(x,m)}{dx} - \nu^2\, \bar{\theta}(x,m) = \bar{\Phi}(x,m)$$

à condition d'annuler l'expression :

$$E_5 = \left[\frac{L\theta}{\rho} + L\,\frac{\partial\theta}{\partial\rho} - \theta\,\frac{\partial L}{\partial\rho}\right]_0^1$$

où $L(\rho,m)$ est solution de l'équation :

$$\frac{L}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{dL}{d\rho} + \frac{d^2L}{d\rho^2} = -\,\nu^2 L$$

En cherchant une solution de la forme :

$$L(\rho,m) = \chi\,(\rho,m)\, \hat{L}(\rho,m)$$

nous obtenons :

$$L(\rho,m) = \sigma\,\rho\,\hat{L}(\rho,m)$$

où $\hat{L}(\rho,m)$ est solution de :

$$\rho\,\frac{\partial^2\hat{L}}{\partial\rho^2} + \frac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} + \nu^2\rho\,\hat{L} = 0$$

E_5 devient :

$$E_5 = \left[\sigma\,\rho\,\hat{L}\,\frac{\partial\theta}{\partial\rho} - \theta\,\rho\,\sigma\,\frac{\partial\hat{L}}{\partial\rho}\right]_0^1 = \left[\sigma\,\rho\left(\hat{L}\,\frac{\partial\theta}{\partial\rho} - \theta\,\frac{\partial\hat{L}}{\partial\rho}\right)\right]_0^1$$

avec les conditions aux limites (3107) et (3108) sur θ :

$$\frac{\partial\theta}{\partial\rho} = 0 \text{ pour } \rho = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial\theta}{\partial\rho} - \text{Bi } \theta \text{ pour } \rho = 1$$

Pour annuler E_5, nous prendrons :

$$\text{et} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} = 0 \quad \text{pour} \quad \rho = 0 \\[2ex] \dfrac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} = -\text{Bi } \hat{L} \quad \text{pour} \quad \rho = 1 \end{cases}$$

Le noyau du 2ème opérateur intégral $L(\rho,m)$ est tel que :

$$L(\rho,m) = \sigma(m)\ \rho\ \hat{L}(\rho,m)$$

où $\hat{L}(\rho,m)$ est solution de l'équation de Bessel :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2\hat{L}}{\partial\rho^2} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} + \nu^2\hat{L} = 0 \\[2ex] \dfrac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} = 0 \quad \text{pour} \quad \rho = 0 \\[2ex] \dfrac{\partial\hat{L}}{\partial\rho} = -\text{Bi } \hat{L} \quad \text{pour} \quad \rho = 1 \end{cases}$$

La solution classique est :

$$\hat{L} = B_1\ J_o(\nu\rho) + B_2\ N_o(\nu\rho)$$

Pour des raisons évidentes de convergence des intégrales, le coefficient B_2 de la fonction de Neuman doit être nul.

Les contraintes aux limites imposent que ν soit solution de :

$$\nu = \text{Bi}\ \frac{J_o(\nu)}{J_1(\nu)} \tag{3117}$$

A chaque valeur ν_m correspond une fonction propre $\hat{L}(\rho,m)$ notée $\hat{L}_m(\rho)$.

Le noyau propre $L_m(\rho) = \sigma(m)\ \rho\ B_1(m)\ J_o(\nu_m\rho)$ sera noté : $L_m(\rho) = \sigma_m\ \rho\ J_o(\nu_m\rho)$, par fusion des constantes $\sigma(m)\ B_1(m)$, avec $\hat{L}_m(\rho) = J_o(\nu_m\rho)$.

Nous allons déterminer σ_m en utilisant l'orthogonalité |1| des fonctions de la base, les ν_m étant solutions de l'équation :

$$\text{Bi } J_o(\nu) - \nu\ J_1(\nu) = 0$$

Nous avons :

$$\int_0^1 \rho\, J_o(\nu_i\rho)\, J_o(\nu_j\rho)\, d\rho = 0 \quad \text{si} \quad i \neq j$$

et $$\int_0^1 \rho\, J_o^2(\nu_i\rho)\, d\rho = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_i^2}\right] J_o^2(\nu_i)$$

La décomposition de $\theta(\rho,x)$ sur la base propre $\hat{L}_m(\rho)$ s'écrit :

$$\theta(\rho,x) = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{b}_n(x)\, \hat{L}_n(\rho)$$

Multipliant par $\rho\, \hat{L}_m(\rho)$ et intégrant sur $[0,1]$, nous obtenons :

$$\hat{b}_m(x) = \frac{2}{\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)} \int_0^1 \theta(\rho,x)\, \rho\, \hat{L}_m(\rho)\, d\rho$$

Si nous prenons pour σ_m :

$$\sigma_m = \frac{2}{\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)},$$

nous avons pour valeur de la coordonnée $b_m(x)$:

$$\hat{b}_m(x) = \bar{\theta}(x,m)$$

D'où la transformation inverse :

$$\boxed{\theta(x,\rho) = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{\theta}(x,m)\, J_o(\nu_m\rho)} \qquad (3118)$$

La procédure de traitement est donc analogue au cas précédent :

1°) Calcul du spectre $[\nu_1, \nu_2, \ldots \nu_m \ldots]$ par résolution de l'équation $Bi\, J_o(\nu) = \nu\, J_1(\nu)$ (cf. annexe)

2°) Pour ρ donné et pour $j = 1,2,\ldots m$:

- calcul de $\hat{L}_j(\rho) = J_o(\nu_j\rho)$
- intégration de l'équation différentielle :

$$\left(\frac{\alpha_L}{\alpha_r}\right) \frac{d^2\bar{\theta}}{dx^2}(x,m) - \frac{1}{\alpha_r}\frac{d\bar{\theta}}{dx}(x,m) - \nu^2\bar{\theta}(x,m) = \bar{\Phi}(x,m) \qquad (3119)$$

3°) Retour aux grandeurs originales par la transformation inverse :

$$\theta(x,\rho) = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{\theta}(x,m)\, J_o(\nu_m \rho)$$

En examinant les équations homogènes (3101) et (3102) et les conditions aux frontières sur le rayon (3103) (3104) (3107) (3108), nous avons justifié le choix opportun des 2 bases orthogonales de fonctions propres. Nous devons maintenant examiner l'action des opérateurs intégraux sur les seconds membres non linéaires des équations (3101) et (3102).

III.I.2 - Action des opérateurs sur le terme de création masse-énergie

III.I.2.1 - Cas de l'équation en concentration

Pour calculer $\Psi(g,\theta)$, il faut connaître $g(x,\rho)$ et $\theta(x,\rho)$ en tout point, c'est-à-dire précisément ce que l'on cherche. Ignorant la valeur de Ψ, nous en prendrons une approximation de la forme |7| |27| :

$$\tilde{\Psi}(x,\rho) = \sum_{j=0}^{M} a_j(x)\, \rho^j \qquad (3121)$$

avec $j = 0, 2, 4 \ldots M = 2k$, pour tenir compte de la symétrie cylindrique de distribution de la température et des concentrations.

Exprimons le $\bar{\Psi}$ approché :

$$\bar{\Psi}_n(x) = \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\, K_n(\rho)\, d\rho = \frac{2}{\beta_r J_o^2(\lambda_n)}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\, \rho\, J_o(\lambda_n\rho)\, d\rho$$

$$\Rightarrow \bar{\tilde{\Psi}}_n(x) = \frac{2}{\beta_r J_o^2(\lambda_n)}\int_0^1 \sum_{j=0}^{M} a_j(x)\, \rho^j\, \rho\, J_o(\lambda_n\rho)\, d\rho = \frac{2}{\beta_r J_o^2(\lambda_n)} \sum_{j=0}^{M} a_j(x)\int_0^1 \rho^{j+1} J_o(\lambda_n\rho)\, d\rho$$

Traitons immédiatement le cas particulier $n = 1$; en effet, nous verrons plus loin que la 1ère valeur propre considérée est nulle ($\lambda_1 = 0$).

Dans ce cas, $\bar{\tilde{\Psi}}_1(x) = \frac{2}{\beta_r} \sum_{j=0}^{M} a_j(x) \int_0^1 \rho^{j+1}\, d\rho$

d'où :

$$\boxed{\bar{\tilde{\Psi}}_1(x) = \frac{2}{\beta_r} \sum_{j=0}^{M} \frac{1}{j+2}\, a_j(x)}$$

Reprenons maintenant le cas général, et posons $r = \lambda_n\rho$:

$$\bar{\tilde{\Psi}}_n(x) = \frac{2}{\beta_r J_o^2(\lambda_n)} \sum_{j=0}^{M} \frac{a_j(x)}{\lambda_n^{j+2}}\int_0^{\lambda_n} r^{j+1}\, J_o(r)\, dr \qquad (3122)$$

La détermination de $\bar{\Psi}_n(x)$ nécessite donc le calcul de $\frac{1}{2}$ (M+2) intégrales I_k du type :

$$I_k = \int_0^{\lambda_n} x^k \, J_o(x) \, dx \quad \text{où} \quad k = 1,3,\ldots \; M+1$$

L'ordre des polynômes (3121) n'étant pas précisé, nous allons établir une relation générale de calcul de ces intégrales.

Choisissons la notation $I_n^q = \int x^n \, J_q(x) \, dx$, où J_q est la fonction de Bessel d'ordre q, et où n prendra les valeurs impaires de l'intervalle [1 .... 2k+1].

Soit q = 0 ; intégrons I_n^o par parties en rappelant que $\frac{d}{dx}(x^\alpha J_\alpha) = x^\alpha J_{\alpha-1}$ |17|

$$\text{d'où : } I_n^o = x^n \, J_1(x) - (n-1) \, I_{n-1}^1$$

Intégrons par parties I_{n-1}^1 :

$$I_{n-1}^1 = x^{n-1} \, J_2(x) - (n-3) \, I_{n-2}^2$$

On montre ainsi par récurrence que l'intégrale I_{n-p}^p s'écrit :

$$I_{n-p}^p = x^{n-p} \, J_{p+1}(x) - (n-2p-1) \, I_{n-p-1}^{p+1} \qquad (3123)$$

Nous arrêterons l'itération lorsque n-p = p+1, c'est-à-dire pour $p = \frac{n-1}{2}$; en effet, l'intégrale $\int x^{k+1} J_k(x) \, dx$ est connue et vaut $x^{k+1} \, J_{k+1}(x)$.

Remarquons que l'indice j de la relation (3121) est pair ; par suite, l'indice n sera impair ; n et p varient alors respectivement de la façon suivante :

$$\begin{cases} n : 1, 3, 5 \ldots\ldots 2k+1 \\ p : 0, 1, 2 \ldots\ldots k \end{cases}$$

Pour $p = \frac{n-1}{2}$, nous avons :

$$I_{n-p}^p = I_{\frac{n+1}{2}}^{\frac{n-1}{2}} = I_{k+1}^k = x^{k+1} \, J_{k+1}(x)$$

En remplaçant n par 2k+1, la relation (3123) s'écrit : $I_{2k+1-p}^p = x^{2k+1-p} \, J_{p+1}(x) - 2(k-p) \, I_{2k-p}^{p+1}$, où nous ferons varier p de k à 0 avec un pas unité.

Ecrivons les premières et les dernières relations ainsi obtenues :

Valeurs de p	Valeurs des intégrales
k	$I^{k}_{k+1} = x^{k+1} J_{k+1}(x)$
k-1	$I^{k-1}_{k+2} = x^{k+2} J_k - 2 I^{k}_{k+1}$
k-2	$I^{k-2}_{k+3} = x^{k+3} J_{k-1} - 2\times 2 I^{k-1}_{k+2}$
k-3	$I^{k-3}_{k+4} = x^{k+4} J_{k-2} - 2\times 3 I^{k-2}_{k+3}$
⋮	⋮
1	$I^{1}_{2k} = x^{2k} J_2 - 2 \times (k-1) I^{2}_{2k-1}$
0	$\overset{\circ}{I}_{2k+1} = x^{2k+1} J_1 - 2 \times (k) I^{1}_{2k}$

Nous recherchons $\overset{\circ}{I}_n$, c'est-à-dire $\overset{\circ}{I}_{2k+1}$; à partir des valeurs ci-dessus, on établit aisément la relation :

$$\overset{\circ}{I}_n = \overset{\circ}{I}_{2k+1} = \sum_{i=1}^{k+1} (-2)^{i-1} \mathcal{A}_k^{k-i+1} x^{2k+2-i} J_i$$

où $\mathcal{A}_k^{k-i+1}$ est le nombre d'arrangements de k en k-i+1.

Ayant $\overset{\circ}{I}_n$ en fonction des J_i pour i = 1,2 ... k+1, nous allons tout exprimer en fonction de J_o et J_1, à l'aide de la relation |2 page 24| :

$$J_{k+1} = \frac{2k}{x} J_k - J_{k-1} \qquad (3124)$$

Appliquons k fois cette relation ; compte tenu de la division par x à chaque fois, nous pouvons écrire :

$$\boxed{\overset{\circ}{I}_n(x) = Q_o^n(x)\, J_o(x) + Q_1^n(x)\, J_1(x)} \qquad (3125)$$

$Q_0^n(x)$ et $Q_1^n(x)$ sont des polynômes en x de degrés respectifs (n-1) et n, sans terme constant.

Posons :

$$\begin{cases} Q_0^n(x) = \sum_{i=1}^{n} q_0^i \, x^i & \Rightarrow \quad Q_0'^n(x) = \sum_{i=1}^{n} i \, q_0^i \, x^{i-1} \\ Q_1^n(x) = \sum_{i=1}^{n} q_1^i \, x^i & \Rightarrow \quad Q_1'^n(x) = \sum_{i=1}^{n} i \, q_1^i \, x^{i-1} \end{cases}$$

<u>Remarque</u> : Bien que nous ayons établi directement que $Q_0(x)$ et $Q_1(x)$ étaient respectivement de degré (n-1) et n, nous les supposons ici de degré n pour alléger la démonstration qui suit.

Nous devons identifier 2n coefficients q_0^i et q_1^i pour i = 1,n. En dérivant la relation (3125), nous obtenons :

$$x^n \, J_0(x) = Q_0'^n(x) \, J_0(x) - Q_0^n(x) \, J_1(x) + Q_1'^n(x) \, J_1(x) + Q_1^n \left[-\frac{1}{x} J_1(x) + J_0(x) \right]$$

$$\begin{cases} x^n = \sum_{i=1}^{n} (i \, q_0^i \, x^{i-1} + q_1^i \, x^i) \\ 0 = \sum_{i=1}^{n} (- q_0^i \, x^i + i \, q_1^i \, x^{i-1} - q_1^i \, x^{i-1}) = \sum_{i=1}^{n} \left| -q_0^i \, x^i + (i-1) \, q_1^i \, x^{i-1} \right| \end{cases}$$

$$\begin{cases} x^n = q_1^n \, x^n + \sum_{i=2}^{n} (i \, q_0^i + q_1^{i-1}) \, x^{i-1} + q_0^1 \\ 0 = - q_0^n \, x^n + \sum_{i=1}^{n-1} (-q_0^i + i \, q_1^{i+1}) \, x^i \end{cases}$$

Nous retrouvons bien : $q_0^n = 0$, ce qui vérifie que le degré de $Q_0^n(x)$ est n-1 ; par identification des deux membres, il apparaît :

$$\begin{cases} q_1^n = 1 \\ q_0^1 = 0 \\ i \, q_0^i + q_1^{i-1} = 0 & \forall i = 2 \text{ à } n \\ -q_0^i + i \, q_1^{i+1} = 0 & \forall i = 1 \text{ à } n-1 \end{cases}$$

$$\left[\begin{array}{ll} q_1^n = 1 & \\ q_o^1 = 0 & \\ n\, q_o^n + q_1^{n-1} = 0 \quad \Rightarrow \quad q_1^{n-1} = 0 & \\ -\, q_o^1 + q_1^2 = 0 & \\ i\, q_o^i + q_1^{i-1} = 0 & \\ & \forall i = 2, \text{ à } n-1 \\ -\, q_o^i + i\, q_1^{i+1} = 0 & \end{array}\right.$$

Les deux dernières équations donnent :

$$i^2\, q_1^{i+1} + q_1^{i-1} = 0 \quad \Rightarrow \quad q_1^{i-1} = -\, i^2\, q_1^{i+1} \quad \text{avec} \begin{cases} q_1^n = 1 \\ \text{et} \quad q_1^{n-1} = 0 \end{cases}$$

Soit :

$$q_1^{n-2k} = (-1)^k\, |(n-1)\,(n-3)\, \ldots\, (n-2k+1)|^2 \quad \text{pour} \quad k = 1 \text{ à } \frac{n-1}{2} \text{ et } q_1^n = 1$$

(3126) $$q_1^{2k} = 0 \quad \text{pour} \quad k = 1 \text{ à } \frac{n-1}{2}$$

$$q_o^k = k\, q_1^{k+1} \quad \text{pour} \quad k = 1 \text{ à } (n-1) \text{ et } q_o^n = 0$$

A titre d'exemple, nous donnons les résultats numériques jusqu'à l'ordre 7 :

$n = 1$	$Q_o^1(x) = 0$	$Q_1^1(x) = x$
$n = 3$	$Q_o^3(x) = 2x^2$	$Q_1^3(x) = -\,4x + x^3$
$n = 5$	$Q_o^5(x) = -\,32x^2 + 4x^4$	$Q_1^5(x) = 64x - 16x^3 + x^5$
$n = 7$	$Q_o^7(x) = 1152x^2 - 114x^4 + 6x^6$	$Q_1^7(x) = -2304x + 576x^3 - 36x^5 + x^7$

(3127)

En résumé, pour exprimer l'action de l'opérateur intégral sur le second membre de l'équation (3101), nous utilisons :

$$\bar{\tilde{\Psi}}_n(x) = \frac{2}{\beta_r J_o^2(\lambda_n)} \sum_{j=0}^{M} \frac{a_j(x)}{\lambda_n^{j+2}}\, \overset{\circ}{I}_{j+1}(\lambda_n) \qquad (3128)$$

avec : $\overset{\circ}{I}_{j+1}(\lambda_n) = Q_o^{j+1}(\lambda_n)\ J_o(\lambda_n) + Q_1^{j+1}(\lambda_n)\ J_1(\lambda_n)$ (3129)

où $Q_o^{j+1}(\lambda_n)$ et $Q_1^{j+1}(\lambda_n)$ (j = 0, 2, 4, 6) sont donnés par les relations ci-dessus.

III.I.2.2 - Cas de l'équation en température

Le second membre transformé s'écrit :

$$\bar{\tilde{\Phi}}_m(x) = \bar{\tilde{\Phi}}_{(m,x)} = \frac{A}{\alpha_r}\int_0^1 \tilde{\Psi}(g,\theta)\ L(\rho,m)\ d\rho$$

$$\bar{\tilde{\Phi}}_m(x) = \frac{2A}{\alpha_r\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)} \sum_{j=0}^{M} a_j(x) \int_0^1 \rho^{j+1}\ J_o(\nu_m\rho)\ d\rho$$

En effectuant le changement de variable $r = \nu_m\rho$, nous pouvons écrire :

$$\bar{\tilde{\Phi}}_m(x) = \frac{2A}{\alpha_r\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)} \sum_{j=0}^{M} \frac{a_j(x)}{\nu_m^{j+2}}\ \overset{\circ}{I}_{j+1}(\nu_m) \qquad (312A)$$

expression dans laquelle $\overset{\circ}{I}_{j+1}(\nu_m) = \int_0^{\nu_m} r^{j+1}\ J_o(r)\ dr$

$I_{j+1}(\nu_m)$ peut donc être calculée à l'aide des relations établies au paragraphe précédent.

On peut ainsi constater que les traitements respectifs des deux cas se ramènent aux calculs d'un seul type d'intégrales, ce qui simplifie notablement le problème.

III.I.2.3 - Calcul des coefficients $a_j(x)$

L'approximation (3121) fait intervenir des coefficients $a_j(x)$. Leur détermination introduira un processus itératif dans l'algorithme de simulation et ne sera définitive qu'après convergence des résultats |7|.

En premier lieu, il faut choisir un ordre de l'approximation polynômiale : soit M = 6 ;

d'où : $\tilde{\Psi}(x,\rho) = a_o(x) + a_2(x)\ \rho^2 + a_4(x)\ \rho^4 + a_6(x)\ \rho^6$

Nous utilisons les relations particulières obtenues pour $\rho = 0,\ 1/3,\ 2/3,\ 1$, ce qui donne pour les $a_i(x)$:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/9 & 1/81 & 1/729 \\ 1 & 4/9 & 16/81 & 64/729 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} a_0 \\ a_2 \\ a_4 \\ a_6 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_{1/3} \\ \Psi_{2/3} \\ \Psi_1 \end{vmatrix}$$

Soit :

$$\begin{cases} a_0(x) = \Psi(x,0) \\ a_2(x) = \frac{27}{2}\,\delta(1/3) - \frac{27}{20}\,\delta(2/3) + \frac{1}{10}\,\delta(1) \\ a_4(x) = -\frac{351}{8}\,\delta(1/3) + \frac{27}{2}\,\delta(2/3) - \frac{9}{8}\,\delta(1) \\ a_6(x) = \frac{243}{8}\,\delta(1/3) - \frac{243}{20}\,\delta(2/3) + \frac{81}{40}\,\delta(1) \end{cases} \qquad (312B)$$

avec :
$$\begin{cases} \delta(1/3) = \Psi(x,1/3) - a_0(x) \\ \delta(2/3) = \Psi(x,2/3) - a_0(x) \\ \delta(1) \quad = \Psi(x,1) - a_0(x) \end{cases}$$

III.I.3 - Recherche des fonctions de Green

L'algorithme complet de simulation nécessite l'intégration des systèmes différentiels (3115) et (3119). Ceci peut être réalisé numériquement par des méthodes de tir |24| |27| mais, sachant que dans notre cas les opérateurs différentiels sont linéaires, il est préférable de calculer les fonctions de Green associées à ces opérateurs.

Nous renverrons le lecteur à l'annexe III.A pour les rappels concernant ces fonctions |3| |16| |14|.

III.I.3.1 - Fonctions de Green associées aux opérateurs (3115)

L'action de l'opérateur intégral dont le noyau est $K(\rho,n)$ doit également porter sur les conditions aux limites axiales. Celles-ci deviennent :

$$* \quad (3105) \qquad \rightarrow \int_0^1 \frac{\partial g}{\partial x} K(\rho,n)\, d\rho = \frac{1}{\beta_L} \int_0^1 \left[gK(\rho,n) - K(\rho,n)\right] d\rho \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{d\bar{g}_n(x)}{dx} = \frac{1}{\beta_L}\, \bar{g}_n(x) - \frac{2\, J_1(\lambda_n)}{\beta_L \lambda_n J_o^2(\lambda_n)} \qquad \text{pour } x = 0$$

Deux cas se présentent maintenant :

a) si $n \neq 1$, $J_1(\lambda_n) = 0$; la relation s'écrit :

$$\boxed{\frac{d\bar{g}_n(x)}{dx} = \frac{1}{\beta_L}\, \bar{g}_n(x) \quad \forall\, n \neq 1} \qquad (3131)$$

b) si $n = 1$, $\lambda_1 = 0$; l'intégrale $\frac{1}{\beta_L} \int_0^1 K(\rho,n)\, d\rho$ s'écrit $\frac{1}{\beta_L} \int_0^1 \frac{2}{J_o^2(\lambda_1)}\, \rho\, J_o(0)\, d\rho = \frac{1}{\beta_L}$

d'où l'expression :

$$\boxed{\frac{d\bar{g}_1(x)}{dx} = \frac{1}{\beta_L}\, (\bar{g}_1(x) - 1)} \qquad (3131 \text{ bis})$$

$$* \quad (3106) \qquad \rightarrow \qquad \boxed{\frac{d\bar{g}_n(x)}{dx} = 0 \qquad \text{pour} \quad x = \bar{x}} \qquad (3132)$$

Posons $y_n = \bar{g}\,(x,n) - \delta_{1n}$, où δ_{1n} est le symbole de Kronecker ($\delta_{1n} = 0$ pour $n \neq 1$ et $\delta_{1n} = 1$ pour $n = 1$).

$$\Rightarrow \qquad \dot{y}_n = \frac{d\bar{g}(x,n)}{dx} \quad ; \quad \ddot{y}_n = \frac{d^2\bar{g}(x,n)}{dx^2}$$

Les équations (3115), (3131) et (3132) deviennent :

$$\begin{cases} \left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \ddot{y}_n - \frac{1}{\beta_r}\, \dot{y}_n - \lambda_n^2\, y_n = \delta_{1n} + \bar{\Psi}_n(x) \\ \dot{y}_n = \frac{1}{\beta_L}\, y_n \quad \text{pour} \quad x = 0 \\ \dot{y}_n = 0 \qquad \text{pour} \quad x = \bar{x} \end{cases}$$

La fonction de Green est solution du système :

$$\begin{cases} \Lambda^n(G_n) = \left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \ddot{G}_n - \frac{1}{\beta_r} \ddot{G}_n - \lambda_n^2 G_n = \delta(x-\xi) & (3133) \\ \dot{G}_n(0) = \frac{1}{\beta_L} G_n(0) & (3134) \\ G_n(\bar{x}) = 0 & (3135) \end{cases}$$

$G_n(x)$ est continue au point $x = \xi$:

$$G_n(\xi^-,\xi) = G_n(\xi^+,\xi) \qquad (3136)$$

De plus, nous avons :

$\int_{\xi^-}^{\xi^+} \Lambda^n (G_n(x))dx=1$, ce qui implique :

$$\left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \dot{G}_n (\xi^+,\xi) - \left(\frac{\beta_L}{\beta_r}\right) \dot{G}_n (\xi^-,\xi) = 1 \qquad (3137)$$

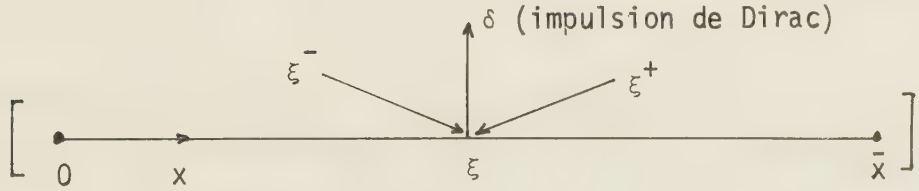
La solution générale de l'équation homogène associée à (3133) s'écrit :

$$G_n = C_1 e^{r_1 x} + C_2 e^{r_2 x}$$

avec

$$\begin{cases} r_1 = \left[\left(\frac{1}{\beta_r}\right) + \sqrt{\left(\frac{1}{\beta_r}\right)^2 + 4 \lambda_n^2 \frac{\beta_L}{\beta_r}}\right] \times \frac{\beta_r}{2\beta_L} & (3138) \\ r_2 = \left[\left(\frac{1}{\beta_r}\right) - \sqrt{\left(\frac{1}{\beta_r}\right)^2 + 4 \lambda_n^2 \frac{\beta_L}{\beta_r}}\right] \times \frac{\beta_r}{2\beta_L} & (3139) \end{cases}$$

L'intervalle de variation se présente ainsi :



Les solutions des équations homogènes associées à (3133) sur $[0,\xi^-]$ et $[\xi^+,\bar{x}]$ seront donc :

$$\begin{cases} G_n^1(x,\xi) = C_1^1 e^{r_1 x} + C_2^1 e^{r_2 x} \quad \text{avec} \quad \dot{G}_n^1(0,\xi) = \frac{1}{\beta_L} G_n^1(0,\xi) \\ G_n^2(x,\xi) = C_1^2 e^{r_1 x} + C_2^2 e^{r_2 x} \quad \text{avec} \quad \dot{G}_n^2(\bar{x},\xi) = 0 \end{cases}$$

Les constantes C_1^1, C_1^2, C_2^1, C_2^2 sont déterminées à l'aide des relations (3134), (3135), (3136), (3137), ce qui donne le système :

$$\begin{cases} r_1\, C_1^1 + r_2\, C_2^1 = \frac{1}{\beta_L}\,(C_1^1 + C_2^1) \\ C_1^1\, e^{r_1\xi} + C_2^1\, e^{r_2\xi} = C_1^2\, e^{r_1\xi} + C_2^2\, e^{r_2\xi} \\ (\frac{\beta_L}{\beta_r})\left[r_1\, C_1^2\, e^{r_1\xi} + r_2\, C_2^2\, e^{r_2\xi}\right[- \frac{\beta_L}{\beta_r}\left[r_1\, C_1^1\, e^{r_1\xi} + r_2\, C_2^1\, e^{r_2\xi}\right] = 1 \\ r_1\, C_1^2\, e^{r_1\bar{x}} + r_2\, C_2^2\, e^{r_2\bar{x}} = 0 \end{cases}$$

Le calcul des constantes est effectué en annexe. Remarquons qu'il est pratique d'opérer par substitution, plutôt que de résoudre le système ci-dessus ; en effet, dans ce dernier cas, les calculs deviennent vite inextricables, et il est très difficile d'y faire apparaître des simplifications.

Finalement, la fonction de Green est :

$$G_n(x) : \begin{cases} G_n^1(x,\xi) = \Omega_n \left[-\frac{r_2}{r_1}\, e^{\bar{x}(r_2-r_1)}\, e^{-r_2\xi} + e^{-r_1\xi}\right]\left[-\frac{r_1}{r_2}\, e^{r_1 x} + e^{r_2 x}\right] \\ \qquad \text{pour } x<\xi \quad (313A) \\ G_n^2(x,\xi) = \Omega_n \left[-\frac{r_1}{r_2}\, e^{-r_2\xi} + e^{-r_1\xi}\right]\left[-\frac{r_2}{r_1}\, e^{\bar{x}(r_2-r_1)}\, e^{r_1 x} + e^{r_2 x}\right] \\ \qquad \text{pour } x>\xi \quad (313B) \end{cases}$$

r_1 et r_2 étant donnés par les relations (3138) (3139) et Ω_n par :

$$\Omega_n = \frac{\beta_r}{\beta_L} \cdot \frac{1}{(r_2-r_1)\,(\frac{r_2}{r_1}\, e^{\bar{x}(r_2-r_1)} - \frac{r_1}{r_2})} \qquad (313C)$$

La solution $\bar{g}_n(x)$ sera obtenue par la relation :

$$\boxed{\bar{g}_n(x) = \delta_{1n} + \int_0^{\bar{x}} G_n(x,\xi)\left[\delta_{1n} + \bar{\Psi}_n(\xi)\right] d\xi} \qquad (313D)$$

III.I.3.2 - Fonctions de Green associées aux opérateurs (3119)

Les conditions aux limites (3109) et (3110) se transforment en :

$$\begin{cases} \dfrac{d\bar{\theta}_m(x)}{dx} = \dfrac{1}{\alpha_L}\,\bar{\theta}_m(x) & \text{pour } x = 0 \qquad (313E) \\[2ex] \dfrac{d\bar{\theta}_m(x)}{dx} = 0 & \text{pour } x = \bar{x} \qquad (313F) \end{cases}$$

La fonction de Green $H_m(x,\xi)$ d'indice m est solution du système :

$$\begin{cases} W^m(H_m) = \left(\dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\right)\ddot{H}_m - \left(\dfrac{1}{\alpha_r}\right)\dot{H}_m - \nu_m^2\,H_m = \delta(x-\xi) & (313G) \\[2ex] \dot{H}_m(0,\xi) = \dfrac{1}{\alpha_L}\,H_m(0,\xi) & (313H) \\[2ex] \dot{H}_m(\bar{x},\xi) = 0 & (313I) \end{cases}$$

Les relations de continuité sur H_m entraînent :

$$\begin{cases} H_m^1(\xi,\xi) = H_m(\xi^-,\xi) = H_m(\xi^+,\xi) = H_m^2(\xi,\xi) & (313J) \\[2ex] \dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\,\dot{H}_m^2(\xi,\xi) - \dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\,\dot{H}_m^1(\xi,\xi) = 1 & (313K) \end{cases}$$

La solution générale du système homogène associé à l'équation (313G) est :

$$H_m(x) = D_1\,e^{S_1 x} + D_2\,e^{S_2 x}$$

avec :

$$\begin{cases} S_1 = \left[\left(\dfrac{1}{\alpha_r}\right) + \sqrt{\left(\dfrac{1}{\alpha_r}\right)^2 + 4\,\nu_m^2\left(\dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\right)}\right] \times \dfrac{\alpha_r}{2\alpha_L} & (313L) \\[2ex] S_2 = \left[\left(\dfrac{1}{\alpha_r}\right) - \sqrt{\left(\dfrac{1}{\alpha_r}\right)^2 + 4\,\nu_m^2\left(\dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\right)}\right] \times \dfrac{\alpha_r}{2\alpha_L} & (313M) \end{cases}$$

Les solutions de l'équation homogène associée à (313G) sur $[0,\xi^-]$ et $[\xi^+,\bar{x}]$ s'écrivent respectivement :

$$\begin{cases} H_m^1(x,\xi) = D_1^1\,e^{S_1 x} + D_2^1\,e^{S_2 x} \quad \text{avec} \quad \dot{H}_m^1(0,\xi) = \dfrac{1}{\alpha_L}\,H_m^1(0,\xi) \\[2ex] H_m^2(x,\xi) = D_1^2\,e^{S_1 x} + D_2^2\,e^{S_2 x} \quad \text{avec} \quad \dot{H}_m^2(\bar{x},\xi) = 0 \end{cases}$$

Les 4 constantes D_1^1, D_2^1, D_1^2, D_2^2 sont déterminées par le système de Cramer obtenu à l'aide des équations (313H), (313I), (313J) et (313K). Tous les calculs étant effectués (cf. annexe), nous trouvons pour la fonction de Green :

$$H_m(x) \begin{cases} H_m^1(x,\xi) = \omega_m \left[-\frac{S_2}{S_1} e^{\bar{x}(S_2-S_1)} e^{-S_2\xi} + e^{-S_1\xi} \right] \left[-\frac{S_1}{S_2} e^{S_1 x} + e^{S_2 x} \right] & \text{pour } x<\xi \quad (313N \\ H_m^2(x,\xi) = \omega_m \left[-\frac{S_1}{S_2} e^{-r_2\xi} + e^{-r_1\xi} \right] \left[-\frac{r_2}{r_1} e^{\bar{x}(r_2-r_1)} e^{r_1 x} + e^{r_2 x} \right] & \text{pour } x>\xi \quad (313O \end{cases}$$

S_1 et S_2 sont donnés par les relations (313L), (313M)

ω_m vaut :

$$\omega_m = \frac{\alpha_r}{\alpha_r} \frac{1}{(S_2-S_1)\left(\frac{S_2}{S_1} e^{\bar{x}(S_2-S_1)} - \frac{S_1}{S_2}\right)} \qquad (313P$$

La solution $\bar{\theta}_m(x)$ s'écrit :

$$\boxed{\bar{\theta}_m(x) = \int_0^{\bar{x}} H_m(x,\xi)\ \bar{\Phi}(\xi,m)\ d\xi} \qquad (313Q$$

III.II - TRAITEMENT NUMERIQUE

III.II.1 - Synthèse des principales étapes de l'algorithme

Nous sommes donc parvenus au terme des développements théoriques concernant la simulation. Remarquons que la résolution analytique a été poussée relativement loin, ce qui permet, sur le plan numérique, de réduire les problèmes d'intégration aux seuls calculs des intégrales définies (313D) et (313Q). Néanmoins, le nombre des constantes à calculer, les changements de variable ou de fonction, les nombreux indices de significations diverses, nécessitent une particulière attention lors de la conception des programmes. Avant d'aborder cet aspect du problème, il convient d'extraire de l'ensemble des calculs précédents les "lignes de force" permettant d'élaborer une procédure numérique de résolution.

Nous pouvons dégager de l'étude théorique complète quatorze étapes principales :

1°) Calcul des deux spectres de valeurs propres $\underline{\lambda}$ et $\underline{\nu}$ respectivement solutions de :

$$\begin{cases} \lambda\ J_1(\lambda) = 0 \\ -\nu\ J_1(\nu) + Bi\ J_0(\nu) = 0 \end{cases}$$

2°) Calcul des polynômes apparaissant lors de l'application de la transformation aux seconds membres polynômiaux. Les polynômes $\underline{Q}_o$ et $\underline{Q}_1$ calculés pour tous les λ_n et ν_m ont les expressions analytiques suivantes :

$Q_o^1(x) = 0$	$Q_1^1(x) = x$
$Q_o^3(x) = 2x^2$	$Q_1^3(x) = -4x + x^3$
$Q_o^5(x) = -32x^2 + 4x^4$	$Q_1^5(x) = 64x - 16x^3 + x^5$
$Q_o^7(x) = 1152x^2 - 144x^4 + 6x^6$	$Q_1^7(x) = -2304x + 576x^3 + x^7 - 36x^5$

3°) Calcul des intégrales $\overset{\circ}{I}_{j+1}$ utilisant les polynômes précédents :

$$\overset{\circ}{I}_{j+1}(x) = Q_o^{j+1}(x)\, J_o(x) + Q_1^{j+1}(x)\, J_1(x)$$

x prenant toutes les valeurs λ_n et ν_m.

4°) Calcul des constantes invariantes lors de la recherche itérative de la solution :

$$\mathcal{C}_1(n) = \frac{2}{\beta_r\, J_o^2(\lambda_n)} \qquad \forall n = 1,2\ldots$$

$$\mathcal{C}_2(n) = \frac{2A}{\alpha_r \left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)} \qquad \forall m = 1,2\ldots$$

5°) Calcul des racines des équations caractéristiques associées aux opérateurs différentiels générateurs des fonctions de Green, et de quelques constantes intervenant dans ces mêmes fonctions :

* $r_1(n) = \frac{1}{2\beta_L}\left[1 + \sqrt{1 + 4\lambda_n^2\, \beta_L\, \beta_r}\right]$

* $r_2(n) = \frac{1}{2\beta_L}\left[1 - \sqrt{1 + 4\lambda_n^2\, \beta_L\, \beta_r}\right]$

* $s_1(m) = \frac{1}{2\alpha_L}\left[1 + \sqrt{1 + 4\nu_m^2\, \alpha_L\, \alpha_R}\right]$

* $s_2(m) = \frac{1}{2\alpha_L}\left[1 - \sqrt{1 + 4\nu_m^2\, \alpha_L\, \alpha_R}\right]$

$$* \quad \Omega(n) = \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{r_1(n)\ r_2(n)}{(r_2(n) - r_1(n))\ (r_2^2(n)\ e^{(r_2-r_1)\bar{x}} - r_1^2(n))}$$

$$* \quad \omega(m) = \frac{\alpha_r}{\alpha_L} \frac{s_1(m)\ s_2(m)}{(s_2(m) - s_1(m))\ (s_2^2(m)\ e^{(s_2-s_1)\bar{x}} - s_1^2(m))}$$

6°) Initialisation par des profils de concentration et de température quelconques, mais non nuls en tout point, et appartenant au domaine [0,1] adimensionnel :

$$g(x,\rho) \quad \text{et} \quad \theta(x,\rho) \quad \forall x, \quad \forall \rho$$

7°) Calcul de la vitesse de réaction adimensionnelle en tout point du réacteur.

8°) Calcul des coefficients de l'approximation polynômiale de la loi de vitesse, en un point de l'axe.

9°) Calcul des seconds membres transformés :

$$\begin{cases} \bar{\tilde{\Psi}}_n(x) = \mathcal{C}_1(n) \sum_{j=0}^{M} a_j(x) \dfrac{\overset{\circ}{I}_{j+1}(\lambda_n)}{\lambda_n^{j+2}} \\ \bar{\tilde{\Phi}}_m(x) = \mathcal{C}_2(m) \sum_{j=0}^{M} a_j(x) \dfrac{\overset{\circ}{I}_{j+1}(\nu_m)}{\nu_m^{j+2}} \end{cases}$$

10°) Calcul des fonctions de Green et des solutions transformées $\bar{g}_n(x)$ et $\bar{\theta}_m(x)$, par convolution des fonctions de Green avec les expressions de l'étape 9 :

$$\bar{g}_n(x) = \delta_{1n} + \int_0^{\bar{x}} G_n(x,\xi)\ [\delta_{1n} + \bar{\tilde{\Psi}}_n(\xi)]\ d\xi$$

$$\bar{\theta}_m(x) = \int_0^{\bar{x}} H_m(x,\xi)\ \bar{\tilde{\Phi}}_m(\xi)\ d\xi$$

Les calculs, effectués pour chaque valeur de n et de m, supposent un balayage complet en ξ pour chaque valeur de x.

11°) Reprise de la procédure précédente, depuis l'étape 9 jusqu'à balayage complet des spectres $\underline{\lambda}$ et $\underline{\nu}$.

12°) Reconstruction des solutions dans le domaine réel, sous forme d'une décomposition dans l'espace des fonctions propres :

$$g(x,\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(x)\, J_o(\lambda_n \rho)$$

$$\theta(x,\rho) = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{\theta}_m(x)\, J_o(\nu_m \rho)$$

13°) Reprise des calculs précédents à partir de l'étape n°8, pour tous les points de l'axe, jusqu'à obtention d'un profil complet $g(x,\rho)$ et $\theta(x,\rho)$ $\forall x$, $\forall \rho$.

14°) Reprise de la procédure à partir de l'étape n°7, avec pour valeurs initiales les profils obtenus à l'étape n°13, pondérés de façon à obtenir la meilleure convergence.

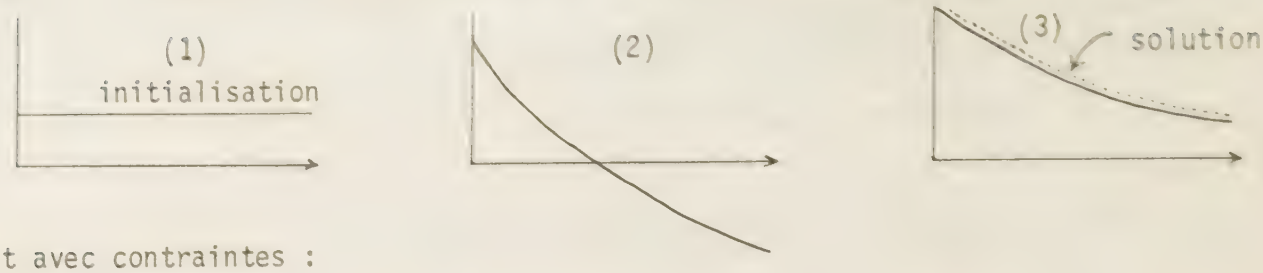
III.II.2 - Remarques sur certains problèmes numériques apparus lors de la simulation

* Si l'on considère les étapes décrites précédemment, on constate que le premier problème rencontré est la résolution de deux équations transcendantes dont les solutions forment deux suites croissantes de nombres positifs. L'annexe |3C| expose brièvement la méthode que nous avons utilisée.

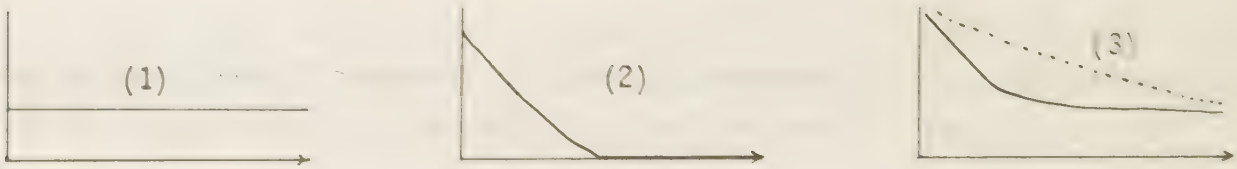
* Le problème de l'initialisation (étape n°6) ne nous a guère posé de difficultés : nous avons en effet initialisé les concentrations avec un plan $g(x,\rho) = 10\ \%\ \forall x, \forall \rho$, et les températures avec $\theta(x,\rho) = 0{,}04\ \forall x, \forall \rho$; ces valeurs, quoique très éloignées du résultat, n'ont pas affecté la convergence de l'algorithme. Il faut cependant remarquer que les premières itérations donnent des variations considérables entre deux profils successifs et qu'un choix intuitif d'un profil initial proche de la réalité donnerait une convergence beaucoup plus douce.

Certains auteurs |7| recommandent dans le cas de processus itératifs de ce type d'ajouter des contraintes physiques ($g(x,\rho) \geq 0$, $\theta(x,\rho) \geq 0$, etc...) au problème, lors des étapes de bouclage. Pour notre part, nous avons considéré que seul le résultat final importait et que le fait de sortir des contraintes physiques pouvait parfois accélérer la convergence ; de toutes façons, nous avons constaté qu'après quelques itérations la recherche se stabilise d'elle-même dans le domaine intérieur aux contraintes.

Exemple d'itérations sans contraintes (concentration) :



et avec contraintes :



* Choix du critère d'arrêt

Nous avons utilisé, à titre de comparaison, deux critères qui étaient calculés à chaque itération : le critère du minimax, et l'écart quadratique moyen, calculés sur tous les points (axe et rayon) et pour les deux profils : température et concentration.

Nous avons constaté que l'écart quadratique moyen était supérieur au maximum des écarts, ce qui peut surprendre a priori. Cependant, ceci se vérifie aisément :

Soit $$EQ = \max_i \left|(x_k^i - x_{k+1}^i)\right| \qquad \forall i = 1,\dots N$$

et $$EQM = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} (x_k^i - x_{k+1}^i)^2}{\sum_{i=1}^{N} x_k^{i\,2}}}$$

$$\Rightarrow EQM \leq \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} EQ^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} x_k^{i\,2}}}$$

$$\Rightarrow EQM \leq EQ \sqrt{\frac{N}{\sum_{i=1}^{N} x_k^{i\,2}}} \leq EQ \sqrt{\frac{N}{N x_{min}^2}}$$

$\Rightarrow EQM \leq \dfrac{EQ}{x_{min}}$; dans notre cas $x_{min} < 1 \Rightarrow$ EQM peut être supérieur à EQ

* Afin d'améliorer la stabilité, et de diminuer les bruits dus aux erreurs d'arrondis et aux approximations, nous avons, ainsi que le font ZONE et CHANG |11|, lissé les profils à chaque itération. Les résultats obtenus ne sont donc pas affectés de discontinuités, de parasites, ou d'oscillations autour de la valeur nominale. Remarquons qu'il est fort vraisemblable que la convergence soit notablement améliorée par l'usage d'un tel procédé.

* Coefficients de bouclage

Nous initialiserons l'itération k+1, à l'aide des expressions :

$$\begin{cases} g^{k+1}_{initial} = g^{k}_{initial} + M_1(g^{k}_{final} - g^{k}_{initial}) \\ \theta^{k+1}_{initial} = \theta^{k}_{initial} + M_2(\theta^{k}_{final} - \theta^{k}_{initial}) \end{cases}$$

Le choix de M_1 et M_2 est délicat ; en effet, un bouclage direct ($M_1 = M_2 = 1$) conduit souvent à un régime instable, et un bouclage faible ($M_1 = M_2 \leq 0{,}5$) donne une convergence très longue. De plus, le choix de ces valeurs ne peut être qu'empirique, car le processus est trop complexe pour être analysé et pour permettre un calcul des M_i optimaux.

Nous avons utilisé tout d'abord $M_1 = M_2 = 1/2$, ce qui a donné une convergence en 23 itérations, puis des coefficients variables : loin du résultat (EQM assez grand), ils sont de l'ordre de 0,5, de façon à éviter des instabilités, et augmentent à l'approche de la fin pour accélérer la convergence :

$$M_1 = M_2 = \frac{1}{\alpha\ EQ + \beta} + \frac{1}{2}$$

(ou EQM)

L'expérience montre que les meilleurs résultats sont obtenus en prenant $\alpha = 10$ et $\beta = 2$.

Ceci a permis de réduire le nombre d'itérations à 14 puis à 11, selon les cas traités ; ce gain est appréciable, chaque itération demandant environ 2 minutes de calcul sur IBM 370-135.

* Calcul numérique des fonctions de Green

Il est impossible de programmer directement les expressions (313A), (313B), (313N), (3130) ; en effet, compte tenu des valeurs numériques des coefficients, certaines exponentielles prennent des valeurs très grandes conduisant à des dépassements de capacité : par exemple $r_2(4) = -189$. Lorsque $\xi = 1$, e^{189} est difficile à calculer précisément ! Ce cas se présente pour

ainsi dire à chaque fois que l'on utilise des fonctions de Green comportant des exponentielles. Il est donc indispensable, avant de programmer, de développer les expressions analytiques, et de regrouper les exposants. En effet, dans ce cas, il apparaît des termes de l'ordre de l'unité, ou très grands en valeur absolue, mais négatifs, ce qui permet d'effectuer les calculs avec précision.

Par exemple, le terme cité plus haut $e^{-r_2\xi}$ devient $e^{r_2(x-\xi)}$ pour $x > \xi$, expression dont l'exposant est, soit fortement négatif (terme quasiment nul), soit faiblement négatif (calcul possible).

III.III - RESULTATS

Les calculs ont donc été effectués sur des données prises dans la littérature [7] [4].

Il s'agit, rappelons-le, d'une réaction du type $A \Longrightarrow B$ (par exemple $SO_2 + 1/2\ O_2 \rightarrow SO_3$, en excès d'oxygène).

Les paramètres avaient les valeurs suivantes :

$\alpha_r = \beta_r = 3,99$

$\alpha_L = \beta_L = 0,00621$

$A = -0,8$

$\bar{x} = 1,25$

$Q_o = 10$

$Q_1 = 20$

$\frac{K_1}{K_o} = 0,25\ e^{10}$

$\frac{E_o}{E_1} = \frac{1}{2}$

$Bi = 1,7$

(grandeurs sans dimension)

Le nombre de valeurs propres utilisées était de 5 ; la convergence était considérée comme obtenue, lorsque le critère était inférieur à $\varepsilon = 10^{-3}$. Le nombre de points écrits était de 61 sur l'axe et 4 sur le rayon. Enfin, la température d'entrée, égale à la température de la paroi, valait 500°K.

Les deux cas, irréversible et réversible, ont été traités. Nous présentons surtout les résultats relatifs à ce dernier, les deux cas donnant des résultats semblables quant à l'allure, mais avec de notables différences en ce qui concerne les valeurs numériques.

Nous présentons dans les pages qui suivent quelques résultats que nous commenterons immédiatement :

Voici tout d'abord les valeurs numériques des paramètres λ_n, et ν_m, le terme "fonction" désignant la précision obtenue sur l'équation, l'arrêt des itérations étant déterminé par une valeur minimum du pas sur λ et ν :

PREMIERE SERIE DE VALEURS PROPRES (λ)

NUMERO	RACINE	FONCTION	ITERATIONS
1	0.0		
2	3.83169	0.266304645D-04	23
3	7.01558	-0.115017841D-04	23
4	10.17349	0.766522439D-05	24
5	13.32368	0.130787131D-04	23

DEUXIEME SERIE DE VALEURS PROPRES (ν)

NUMERO	RACINE	FONCTION	ITERATIONS
1	1.51936	0.124410771D-07	37
2	4.23172	-0.414099410D-07	49
3	7.24963	-0.105581128D-05	43
4	10.33775	-0.155733601D-05	42
5	13.45001	-0.537390344D-05	41

****

* La figure 3.1 représente la variation bidimensionnelle de la concentration. Remarquons que, selon le rayon, celle-ci varie au maximum de 0,011 et que l'on pourrait sans grand dommage la considérer comme variant linéairement au voisinage du tiers du réacteur, et constante dans le reste. Dans le cas non réversible, l'écart atteint 4 à 5 % et le modèle bidimensionnel est alors beaucoup plus justifié.

* La figure 3.2 donne la nappe de température, toujours selon les deux dimensions. Nous constatons que l'exothermicité de la réaction place un maximum de température environ au quart du réacteur. L'écart maximum centre-paroi est ici de 33°C. Dans le cas non réversible, il vaut 63°C.

* La figure 3.3 présente quelques profils radiaux de température, dans le cas non réversible. On peut constater qu'ils sont facilement approximables par des paraboles, ce qui peut être utile si l'on désire effectuer une simulation simplifiée.

* Les courbes 3.4.1 et 3.4.2 mettent en évidence les contributions des différentes valeurs propres à la solution ... et permettent de constater qu'avec seulement deux valeurs propres la précision est largement satisfaisante Malheureusement, il est vraisemblable que tel n'est pas toujours le cas et que, malgré les oscillations d'amplitude décroissante autour de zéro propres aux fonctions de Bessel, certains problèmes nécessitent un ordre de troncation nettement plus élevé.

* Les courbes 3.5.1 et 3.5.2 représentent respectivement les variations des profils centraux de concentration et de température au cours de quelques itérations, dans le cas d'un bouclage variable. Ceci met en évidence les importantes variations des premières itérations.

* Les figures 3.6.1 et 3.6.2 explicitent la variation du coefficient de bouclage au cours des itérations (cas où il y a 14 itérations) et en fonction du critère.

* Enfin, les figures 3.7.1 et 3.7.2 indiquent comment varient les critères selon les itérations, avec modification ou non des coefficients M_1 et M_2. On constate l'amélioration très nette de la rapidité, lorsque ces coefficients varient.

****

PROFIL DE CONCENTRATION

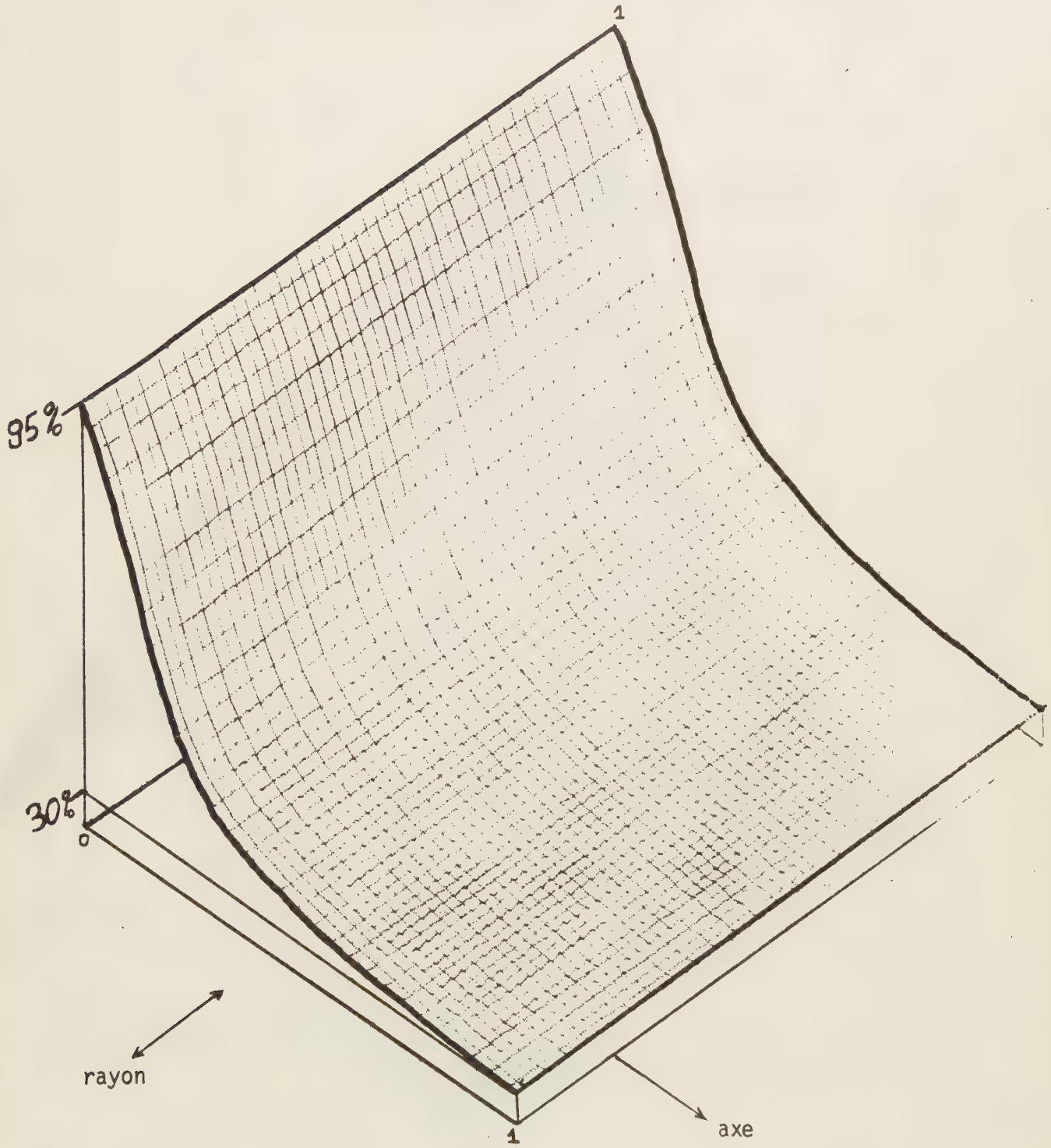


Fig. 3.1

NAPPE DES TEMPERATURES

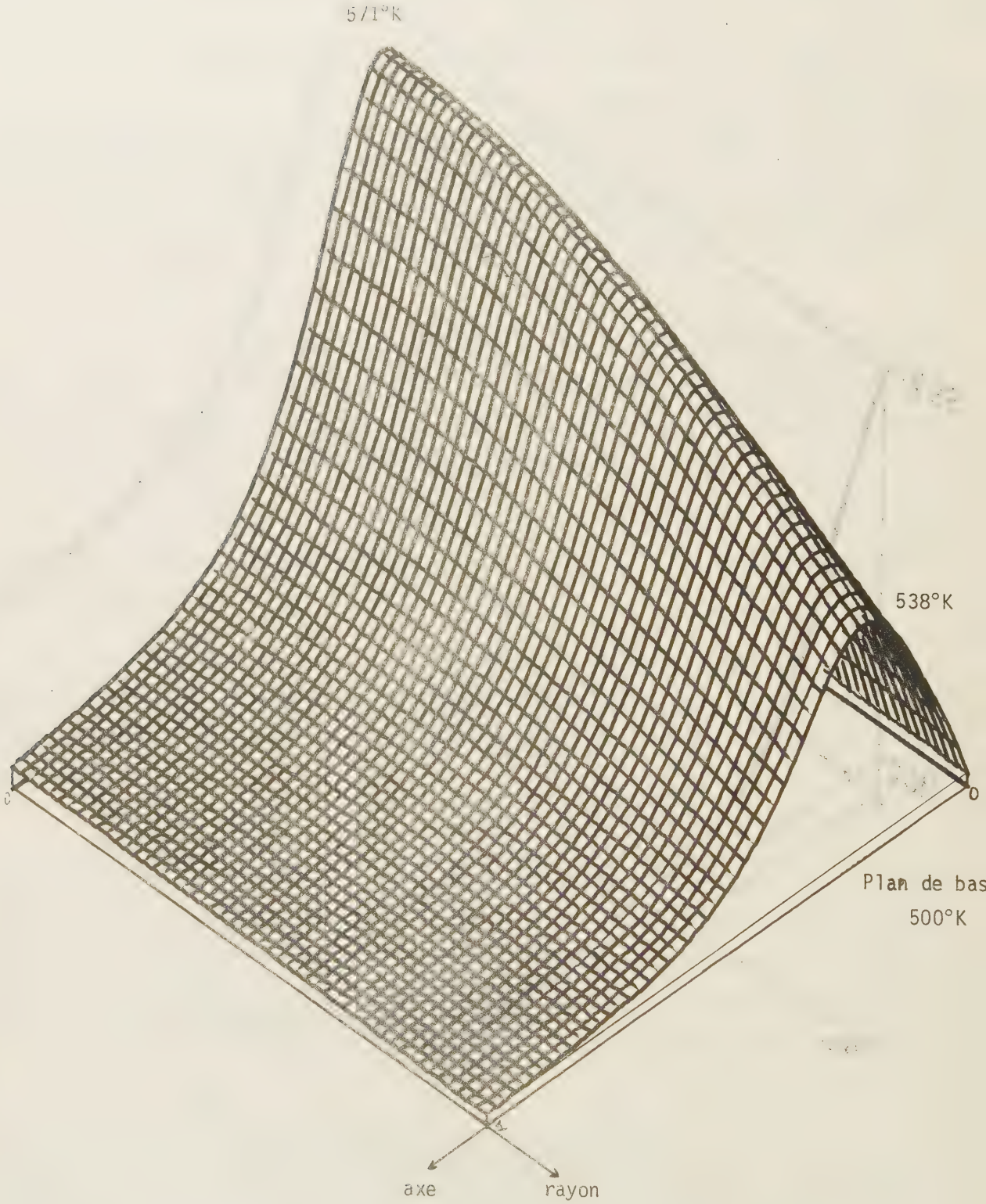
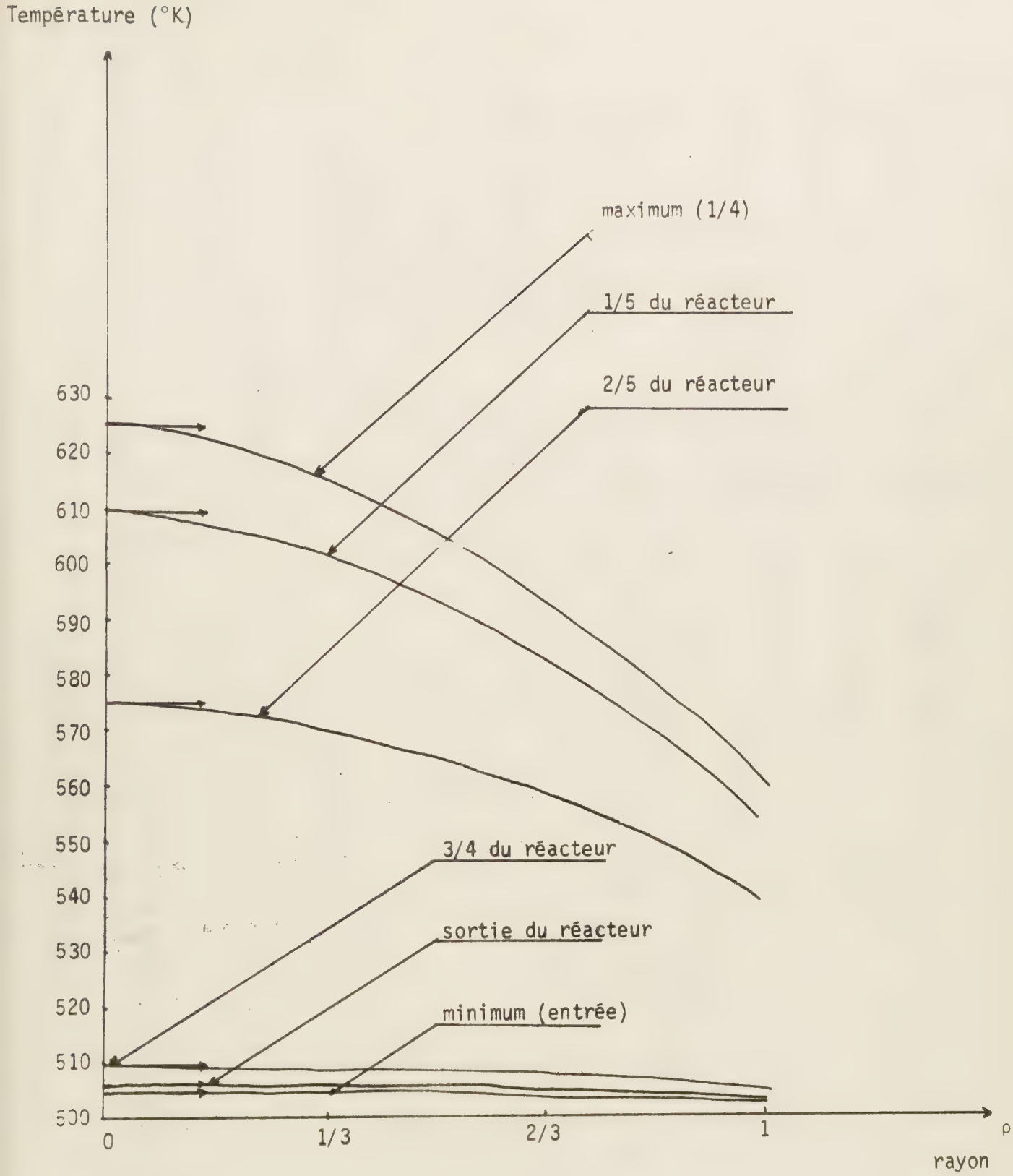


Fig. 3.2



QUELQUES PROFILS RADIAUX DE TEMPERATURE

Fig. 3.3

(échelles égales)

Fig. 3.4.2

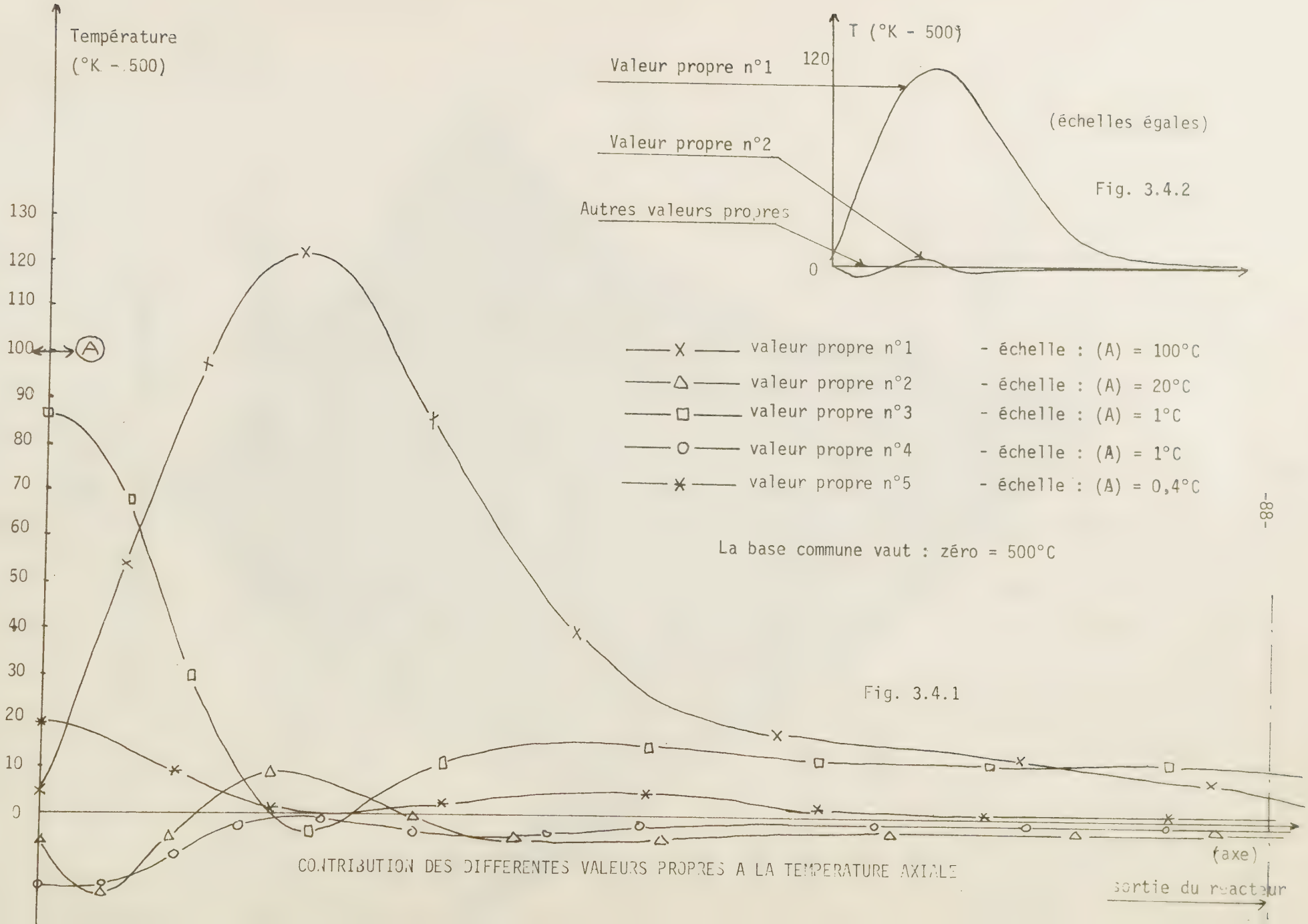


Fig. 3.4.1

CONTRIBUTION DES DIFFERENTES VALEURS PROPRES A LA TEMPERATURE AXIALE

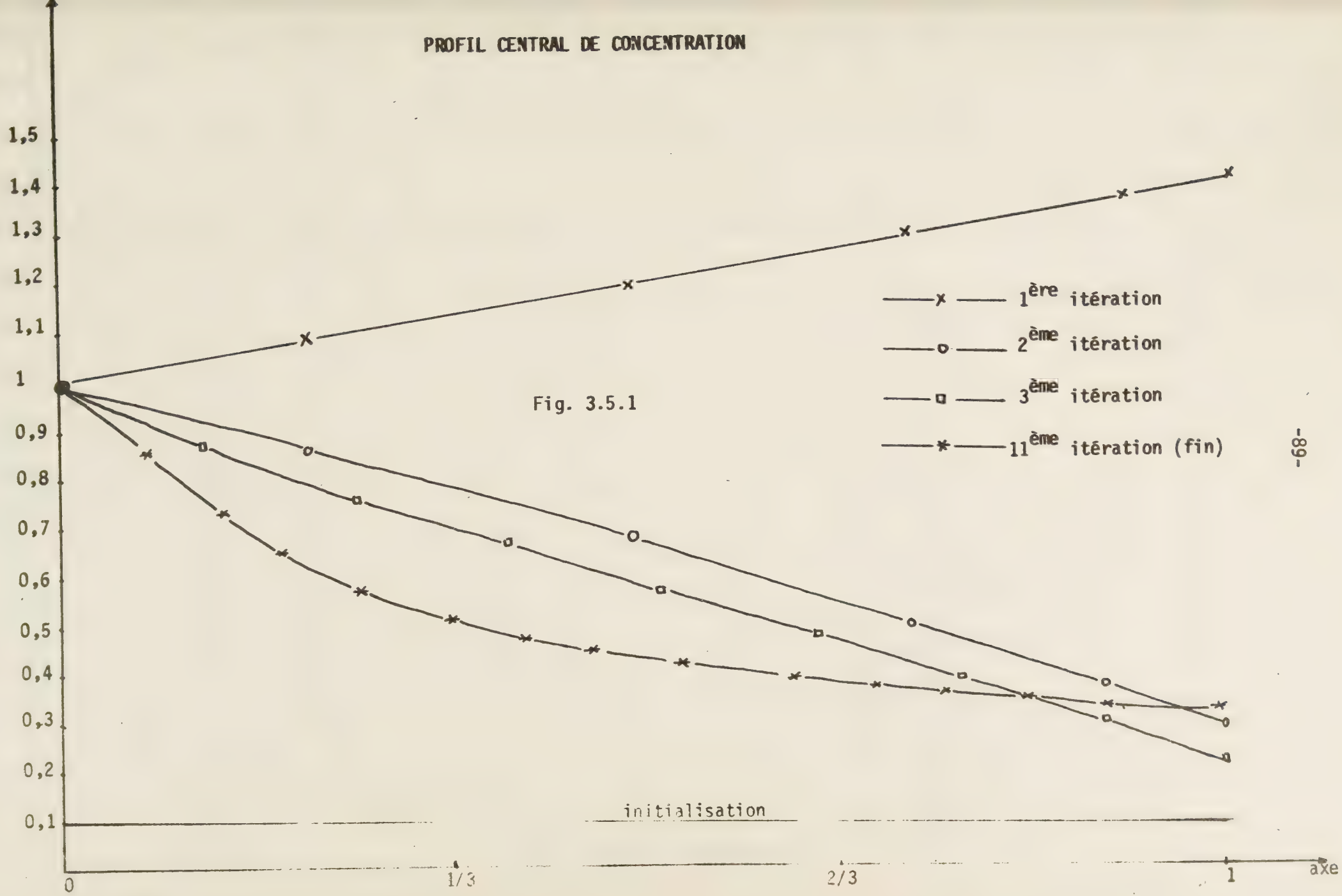
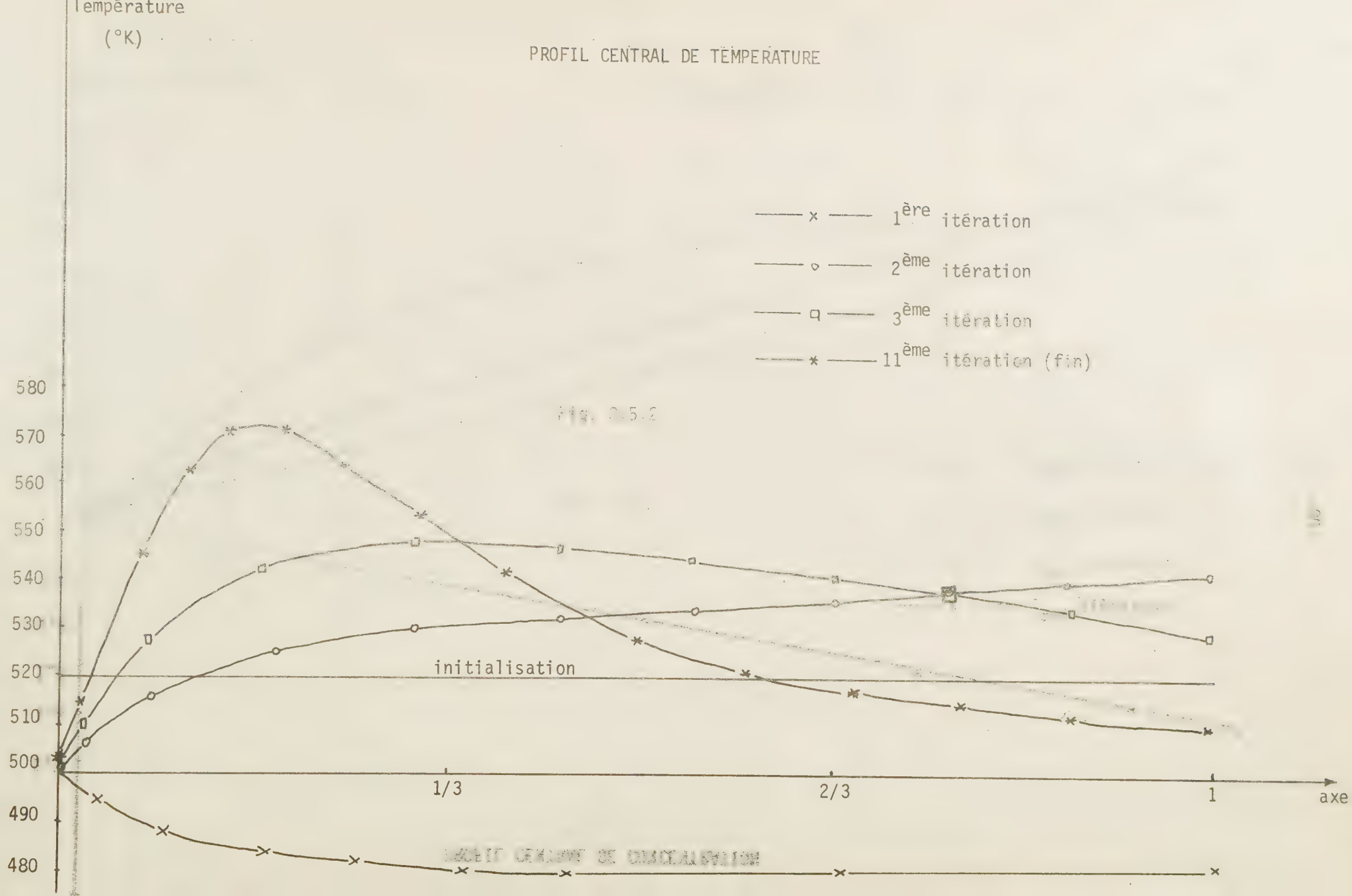

PROFIL CENTRAL DE CONCENTRATION
1,5
1,4
1,3
1,2
1,1
1
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0
1/3
2/3
1
axe
1ère itération
2ème itération
3ème itération
11ème itération (fin)
initialisation

Fig. 3.5.1


Température
(°K)
PROFIL CENTRAL DE TEMPERATURE
1ère itération
2ème itération
3ème itération
11ème itération (fin)
580
570
560
550
540
530
520
510
500
490
480
initialisation
1/3
2/3
1
axe

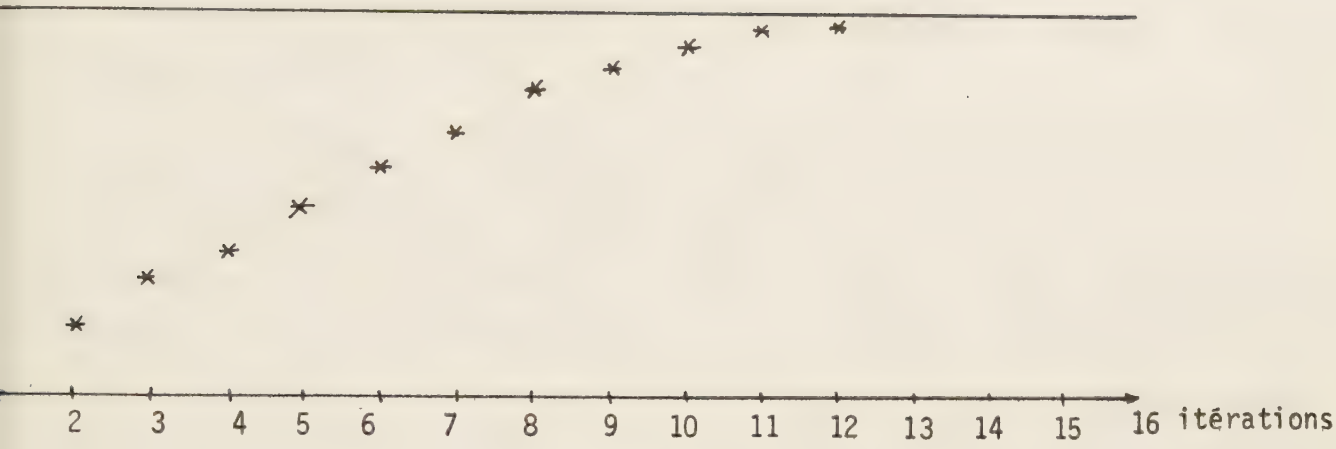


Fig. 3.6.1

VARIATION DU COEFFICIENT DE BOUCLAGE AU COURS DES ITERATIONS

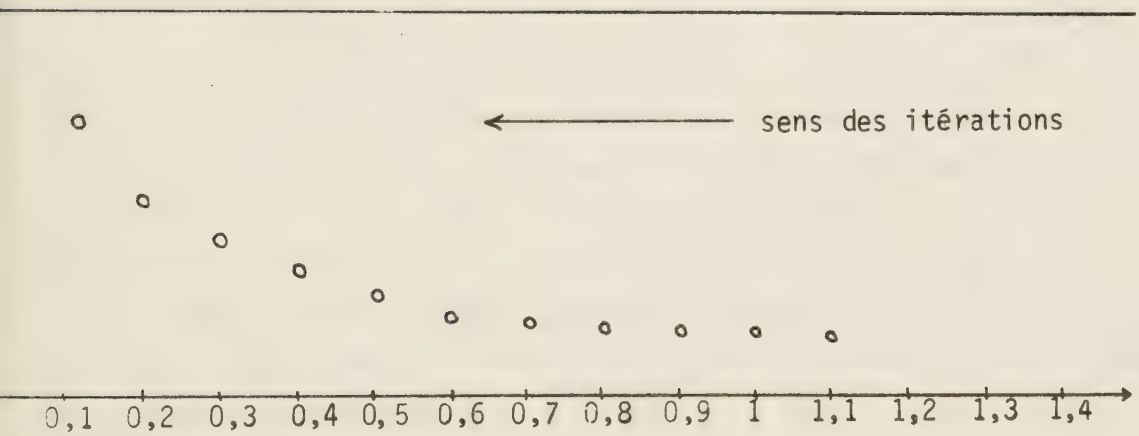
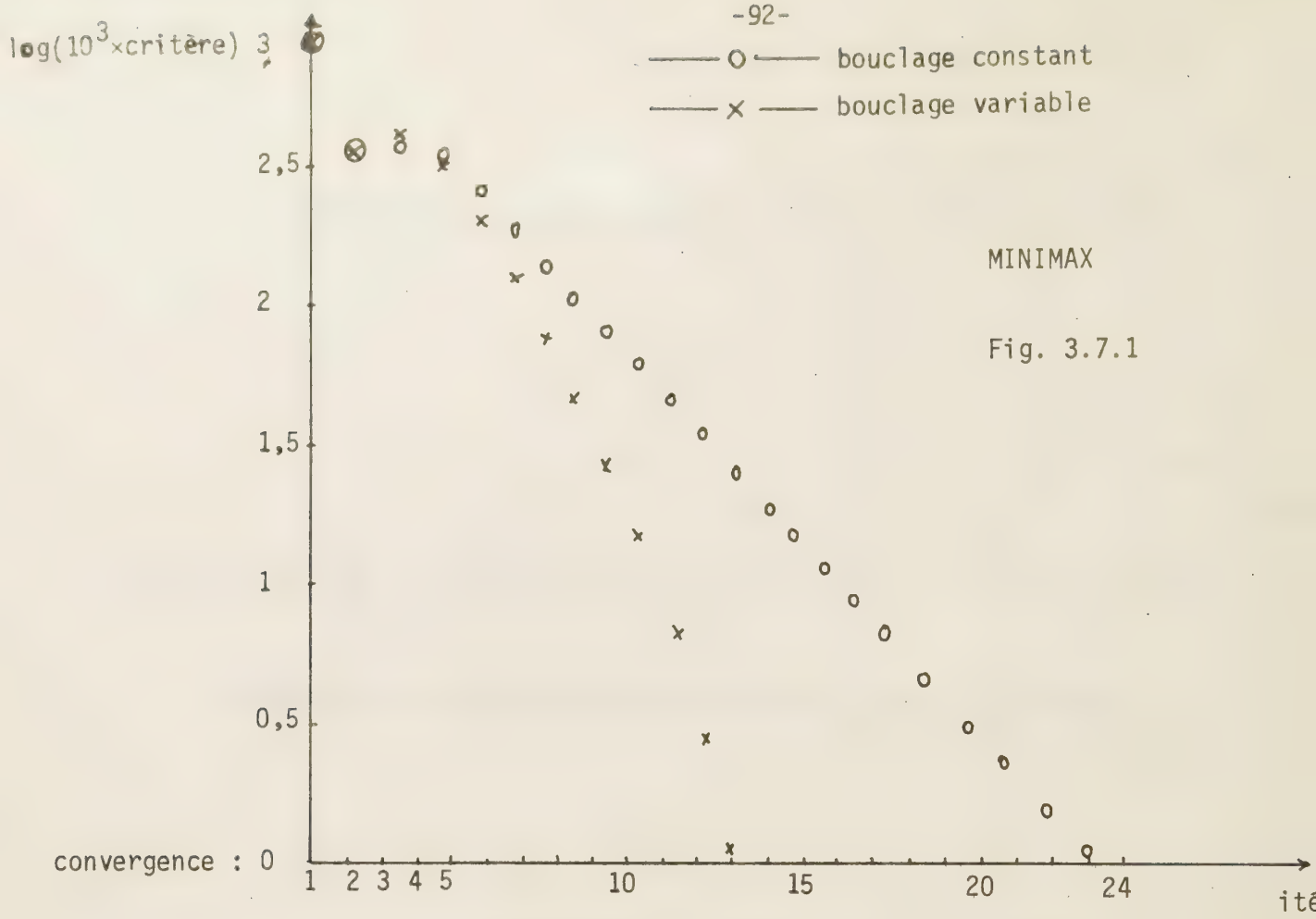
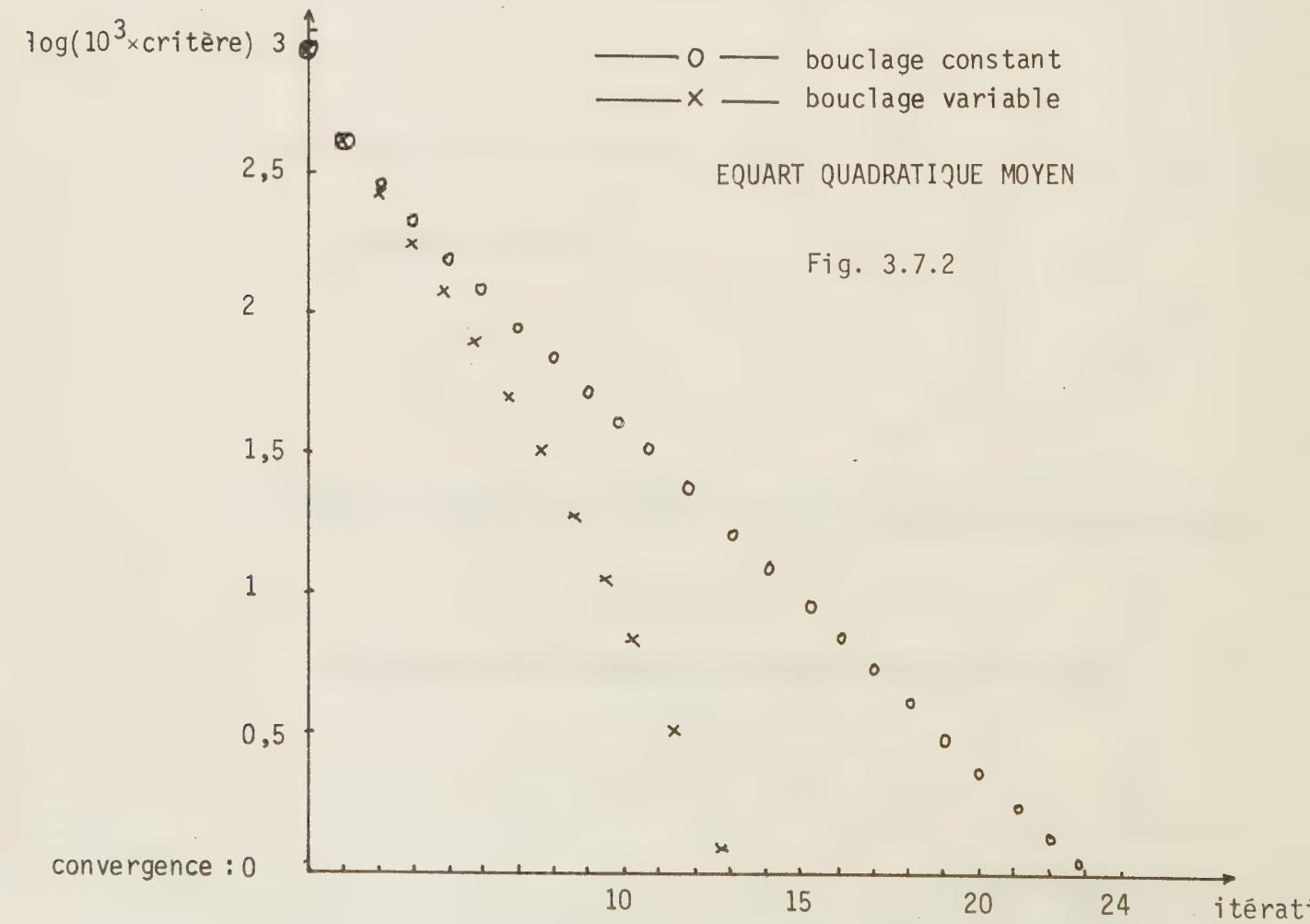


Fig. 3.6.2

VARIATION DU COEFFICIENT DE BOUCLAGE AVEC LE CRITERE



VARIATION DU CRITERE SELON LES ITERATIONS



VARIATION DU CRITERE SELON LES ITERATIONS

III.IV - CONCLUSION DE LA TROISIEME PARTIE

Effectuons un rapide bilan des travaux effectués au cours de cette troisième partie :

Le problème posé peut se formuler ainsi : soit un réacteur chimique représenté par un système d'équations aux dérivées partielles elliptiques, avec conditions aux limites aux deux extrémités sur chacune des variables, et couplées par un second membre non linéaire ; comment obtenir par simulation numérique les profils bidimensionnels de concentration et de température ?

Pour cela, nous avons transformé le système en un grand nombre d'équations différentielles linéaires ; puis nous avons donné l'expression générale d'une approximation polynômiale du second membre, après transformation intégrale ; enfin, nous avons trouvé les fonctions de Green associées aux opérateurs différentiels, ce qui n'a laissé comme intégration numérique à effectuer que le calcul d'intégrales définies simples.

Cette procédure, que nous avons complètement détaillée dans le cas précis de la réaction $A \rightleftharpoons B$ se généralise très facilement à des systèmes multi-produits, et éventuellement multi réactionnels, tels ceux décrits dans la première partie. Nous attirons encore une fois l'attention sur l'un des principaux intérêts de cette méthode, qui est de retarder le plus possible le passage continu-discret, c'est-à-dire de pousser le plus loin possible toute la résolution analytique.

A notre connaissance, il semble que seuls DENTE, RANZI et BIARDI |7| aient utilisé une telle méthode de simulation dans le cas d'un réacteur. Pour notre part, nous avons en outre justifié complètement l'usage des opérateurs intégraux dans ce cas, élaboré totalement le modèle de connaissance à l'aide des lois de la chimie et de la physique, traité le cas d'une réaction réversible, donné une formulation générale récurrente des intégrales $\overset{\circ}{I}_{j+1}$, et utilisé un coefficient de relaxation variable donnant un gain de temps particulièrement appréciable.

Enfin, ainsi que nous le constaterons, l'usage des transformations intégrales peut parfois résoudre certains problèmes de commande frontière d'une manière assez agréable, puisqu'il permet de se ramener à des procédures classiques.

Cet aspect de la méthode, entièrement nouveau à notre connaissance, fera l'objet de la quatrième partie.

QUATRIEME PARTIE

PROBLEMES DE COMMANDE OPTIMALE

IV.I - POSITION DU PROBLEME ET METHODE GENERALE -

IV.I.1 - Introduction

Les résultats que nous avons présentés dans la troisième partie provenaient, rappelons-le, de la simulation d'un réacteur chimique tubulaire dans lequel la température de paroi était constante et égale à la température d'entrée. Cependant, il faut remarquer que ces conditions opératoires ne sont pas nécessairement optimales. En effet, certaines réactions (exothermiques réversibles) ou certains ensembles complexes de réactions (reforming catalytique) peuvent conduire à de meilleurs résultats à la sortie (concentration finale de certains produits) si la température de paroi varie en fonction de la position axiale. Ce type de problèmes (commande optimale en température) a été abondamment étudié dans la littérature |6| |4| |15| |21| |8| |24| dans le cas où l'on utilise les modèles monodimensionnels, c'est-à-dire où la commande apparaît explicitement dans le modèle d'état.

Cependant, pour notre part, l'exemple que nous traitons ne se prête pas directement à une optimisation simple par les méthodes classiques (Calcul des variations, Principe du Maximum, Programmation dynamique, etc...)

En effet, la grandeur de commande θ_p (température de paroi) n'apparaît que dans une condition aux limites, du type $\frac{\partial\theta}{\partial\rho} + Bi\,\theta = Bi\,\theta_p$ pour $\rho = 1$. C'est dont un problème de commande frontière, dans le cas d'équations aux dérivées partielles couplées du deuxième ordre.

Or, au cours des travaux que nous avons effectués sur l'algorithme de simulation, il est apparu qu'à un certain stade de la transformation intégrale, les conditions aux limites choisies pour définir le noyau de l'opérateur pouvaient faire intervenir la fonction de commande directement au sein des équations transformées. Ce point est très intéressant, car le nouveau système différentiel, dont les opérateurs sont linéaires, est à coefficients constants ; il est donc possible de traiter le problème d'optimisation de façon classique, sur les équations transformées. Un certain nombre de problèmes subsistent néanmoins :

- le système est à valeurs limites aux deux bouts.

- les conditions aux limites sont du type $\alpha \frac{dy}{dx} + \beta y = \gamma$, ce qui nécessite un certain nombre de changements de fonction.
- le critère d'optimisation et les seconds membres doivent pouvoir être exprimés en fonction des grandeurs "température" et "concentrations", transformées par l'action des opérateurs intégraux.

Afin de clarifier la méthode utilisée, nous allons tout d'abord présenter, dans les pages qui suivent, une analyse générale de la procédure, sans donner de détails de calculs.

Puis, nous traiterons en détail le problème théorique du réacteur simulé dans la troisième partie. Enfin, pour préciser simplement l'esprit et l'intérêt de cette procédure, nous donnerons une application, simple et didactique, au cas d'un échangeur ou d'un four cylindrique.

IV.I.2 - Procédure générale

On considère d'une façon générale un réacteur cylindrique catalytique dans lequel réagissent P produits au cours d'une seule réaction.

En régime permanent, le modèle bidimensionnel d'un tel processus peut s'écrire :

$$(4121)\quad \begin{cases} a \ : L^i(g^i) + C_i \left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial g}{\partial\rho}\right)\right] = \phi(\underline{g},\theta) & \forall i = 1,2,\ldots P \\ b \ : L(\theta) + \gamma\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\theta}{\partial\rho}\right)\right] = \phi(\underline{g},\theta) \end{cases}$$

où :

- $L^i(g^i)$ et $L(\theta)$ sont des opérateurs différentiels linéaires sur la variable axiale, du 2ème ou du 1er ordre selon que l'on tient compte ou non de la diffusion et de la conduction axiales :

$$\left(\text{par exemple : } L^i(g^i) = a_i \frac{\partial^2 g^i}{\partial x^2} + b_i \frac{\partial g^i}{\partial x}\right)$$

- $\underline{g}^T = [g^1 g^2 \ldots g^P]^T$ représente les concentrations adimensionnelles des P produits et θ la température adimensionnelle.
- la variable axiale x et la variable radiale ρ appartiennent toutes deux au segment $[0,1]$.

Le réacteur est chauffé sur la paroi et la température adimensionnelle de celle-ci est $\theta_p(x) = \frac{T_p(x) - T_e}{T_e}$

A l'entrée ($x = 0$) et à la sortie ($x = 1$) du réacteur, les conditions aux limites sur g^j et θ sont du type : $\alpha \frac{\partial y}{\partial x} + \beta y = \gamma$. Nous supposerons qu'elles sont en nombre suffisant compte tenu de l'ordre des opérateurs L^i et L.

Les conditions sur le rayon sont les relations habituelles :

$$\begin{cases} \rho = 0 & \{\frac{\partial g^i}{\partial \rho} = 0 \quad \forall i = 1,2, \dots P \quad \text{et} \quad \frac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0\} \\ \rho = 1 & \{\frac{\partial \theta}{\partial \rho} + Bi\,\theta = Bi\,\theta_p(x) \text{ et } \frac{\partial g^i}{\partial \rho} = 0 \quad \forall i = 1,2, \dots P\} \end{cases}$$

Nous supposerons que la solution $\{g^i(x,\rho) \forall i = 1,2, \dots P, \theta(x,\rho)\}$ existe et est unique pour un $\theta_p(x)$ donné.

Soit $K_n(\rho)$ et $L_m(\rho)$ les noyaux de deux opérateurs intégraux.

Posons :

$$\bar{g}^i_n(\rho) = \int_0^1 g^i(x,\rho)\, K_n(\rho)\, d\rho$$

$$\bar{\theta}_m(\rho) = \int_0^1 \theta(x,\rho)\, L_m(\rho)\, d\rho$$

Si l'on applique une transformation intégrale aux équations (4121)a, on obtient après une double intégration par parties le système :

$$L^i(\bar{g}^i_n) + C_i\, E^i_n = \bar{\phi}^1_n(\underline{g},\theta) \qquad \forall i = 1,2 \dots P \qquad (4122)a$$

dans lequel $\quad \bar{\phi}^1_n = \int_0^1 \phi(\underline{g},\theta)\, K_n(\rho)\, d\rho$

Nous avons montré au chapitre 3 que E^i_n peut prendre la forme :

$$E^i_n = -\lambda_n^2 \bar{g}^i_n(x)$$

à condition de poser $K_n(\rho) = \mu_n \rho \quad \hat{K}_n(\rho)$, où $\hat{K}_n(\rho)$ est solution d'une équation de Bessel :

$$\rho \frac{\partial^2 \hat{K}_n}{\partial \rho^2} + \frac{\partial \hat{K}_n}{\partial \rho} + \lambda_n^2 \rho\, \hat{K}_n = 0 \qquad \text{avec} \begin{cases} \frac{\partial \hat{K}_n}{\partial \rho} = 0 & \text{pour } \rho = 0 \\ \frac{\partial \hat{K}_n}{\partial \rho} = 0 & \text{pour } \rho = 1 \end{cases}$$

Ceci suppose que la transformation intégrale est possible, c'est-à-dire que :

(1) * $\left.\begin{matrix} g^i(x,\rho) \\ \theta\ (x,\rho) \end{matrix}\right\} \in \mathcal{L}^2([0,1]^2)$ (ensemble des fonctions de carré sommable).

(2) * Les fonctions $g^i(x,\rho)$ et $\sigma(x,\rho)$ peuvent être respectivement decomposees sur deux bases de fonctions propres, ces dernières étant orthogonales avec un poids ρ, et les valeurs propres attachées aux fonctions propres formant une suite infinie croissante discrète de nombres positifs.

Une étude similaire à celle effectuée dans la troisième partie permet de définir ensuite les grandeurs suivantes :

- $\{\lambda_n\} = \{\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_\infty\}$ ensemble des solutions de l'équation $\lambda J_1(\lambda)=0$
  (J_1 fonction de Bessel d'ordre 1)
  (J_0 fonction de Bessel d'ordre 0)
- $\hat{K}_n(\rho) = J_0(\lambda_n\rho)$
- $\mu_n = 2/J_0^2(\lambda_n)$

Dans ces conditions, on peut obtenir g^i par la relation :

$$g^i(x,\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n^i(x)\ J_0(\lambda_n\rho) \qquad (4123)$$

La même procédure peut être appliquée à l'équation (4121)b, avec toutefois un opérateur légèrement différent, défini par :

$$L_m(\rho) = \sigma_m\rho \quad L_m(\rho)$$

$\hat{L}_m(\rho)$ étant solution de : $\rho \dfrac{\partial^2\hat{L}_m}{\partial\rho^2} + \dfrac{\partial\hat{L}_m}{\partial\rho} + \nu_m^2\ \hat{L}_m = 0$

avec $\{\dfrac{\partial\hat{L}_m}{\partial\rho} = 0$ pour $= 0$ et $\dfrac{\partial\hat{L}_m}{\partial\rho} = -\ Bi\hat{L}_m$ pour $\rho = 1\}$

Ceci permet de définir :

- $\{\nu_m\} = \{\nu_1, \nu_2 \dots \nu_\infty\}$ ensemble des solutions de l'équation :

$$\nu\ J_1(\nu) = Bi J_0(\nu)$$

- $\sigma_m = \dfrac{2}{\left[1 + \dfrac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_0^2(\nu_m)}$
- $\hat{L}_m(\rho) = J_0(\nu_m\rho)$

Ainsi, l'opérateur étant convenablement choisi, on peut introduire de façon explicite la commande dans le nouveau système différentiel. En effet, le terme résiduel de l'équation transformée s'écrit :

$$\mathcal{R}_m = \gamma\left[\sigma_m\rho\left(\hat{L}_m \frac{\partial\theta}{\partial\rho} - \theta\frac{\partial\hat{L}_m}{\partial\rho}\right]\right|_0^1 = \gamma\sigma_m\left[\hat{L}_m(1)\frac{\partial\theta}{\partial\rho}(x,1) - \theta(x,1)\frac{\partial\hat{L}_m}{\partial\rho}(1)\right]$$

$$\mathcal{R}_m = \gamma\sigma_m\hat{L}_m(1)\left[-Bi\theta(x,1) + Bi\theta_p(x)\right] - \gamma\sigma_m\theta(x,1)\left(-Bi\hat{L}_m(1)\right)$$

$$\mathcal{R}_m = \gamma\sigma_m Bi\,\hat{L}_m(1)\,\theta_p(x) = \frac{2Bi\gamma}{(1+\frac{Bi^2}{m^2})J_0(\nu_m)}\,\theta_p(x) = s_m\,\theta_p(x)$$

$\theta_{(x,\rho)}$ sera donné par la relation : $\theta_{(x,\rho)} = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{\theta}_m(x)\, J_0(\nu_m\rho)$ (4124)

Si l'on définit enfin :

$$\bar{\phi}_m^2(\underline{g},\theta) = \int_0^1 \phi(\underline{g},\theta)\, L_m(\rho)\, d\rho$$

Le système (4121) devient :

$$(4125)\quad \begin{cases} \mathcal{L}_{n,i}(\bar{g}_n^i) = L^i(\bar{g}_n^i) - \lambda_n^2\bar{g}_n(x) = \bar{\phi}_n^1(g,\theta) & \forall i = 1, P,\ \forall n = 1,\infty \\ \Lambda_m(\theta) = L(\bar{\theta}_m) - \nu_m^2\,\bar{\theta}_m(x) = -s_m\,\theta_p(x) + \bar{\phi}_m^2(\underline{g},\theta) & \forall m = 1,\infty \end{cases}$$

avec les nouvelles conditions aux limites sur x, du type :

$$\alpha'\frac{\partial y}{\partial x} + \beta'\,y = \gamma' \qquad \text{pour } x = 0 \text{ et } x = 1$$

Nous supposerons maintenant qu'il est possible d'opérer la mise en forme suivante, soit de façon rigoureuse, soit de manière approchée :

$$\bar{\phi}_n^1(\underline{g},\theta) = f_n^1(\bar{g}_1^1, \bar{g}_2^1, \ldots \bar{g}_\infty^1, \bar{g}_1^2, \bar{g}_2^2 \ldots \bar{g}_\infty^2, \ldots, \bar{g}_1^p, \bar{g}_2^p \ldots \bar{g}_\infty^p\ \bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2, \ldots \bar{\theta}_\infty)$$

$$\bar{\phi}_m^2(\underline{g},\theta) = f_m^2(\text{———————————————————————————})$$

Nous obtenons donc le nouveau système différentiel :

$$(4126)\quad \begin{cases} \mathcal{L}_{n,i}(\bar{g}_n^i) = f_n^1\left(\bar{g}_k^i \begin{cases}\forall i = 1,2\ldots p \\ \forall k = 1,2\ldots\infty\end{cases},\ \bar{\theta}_\ell,\ \forall \ell = 1,2\ldots\infty\right) \\ \Lambda_m(\bar{\theta}_m) = -s_m\,\theta_p(x) + f_m^2(\quad " \quad " \quad " \quad) \\ \forall n = 1,2\ \ldots\ \infty\ ,\ \forall m = 1,2\ \ldots\ \infty\ ,\ \forall i = 1,2\ \ldots\ p \end{cases}$$

où $\mathcal{L}_{n,i}$ et Λ_m sont linéaires.

Ce nouveau système obtenu est un système différentiel à valeurs limites aux deux bouts dans lequel la fonction *"commande"* $\theta_p(x)$ apparaît explicitement sous la forme la plus simple. Dès lors, le problème reviendra à une forme

classique si l'on peut y adjoindre un critère d'optimisation portant sur les fonctions transformées, ce qui n'est pas toujours le cas.

En effet, certains critères spéciaux risquent de ne pas pouvoir être transformés en fonction des $\bar{g}_n^i$ et $\bar{\theta}_m$ de façon analytique, ou même de façon exploitable pratiquement.

Dans notre cas, nous supposerons qu'il faille maximiser la concentration à la sortie d'un produit k, tout en ne dépensant pas trop d'énergie :

Soit $J = \int_0^1 (1-g^k(1,\rho))d\rho + \alpha\int_0^1 \frac{1}{2}\ \theta_p^2(x)\ dx$

qui se transforme en :

$$J = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n^k(1)\ \frac{1}{\lambda n} \int_0^{\lambda n} J_0(r)\ dr + \alpha\int_0^1 \frac{1}{2}\ \theta_p^2(x)\ dx$$

Lors du traitement numérique, il sera nécessaire de tronquer les sommes infinies : soit N l'ordre commun de troncation choisi.

A l'aide de changements de variables simples, il est toujours possible de mettre le système (4126) sous la forme habituelle :

(4127) $\dot{X} = \underline{F}(\underline{x},u)$, où u est la commande $\theta_p(x)$

La dimension de $\underline{X}$ sera p = 2N(P+1) si $\mathcal{L}$ et Λ sont du deuxième ordre.

Les conditions aux limites seront aux deux bouts :

$$\begin{cases} X_i(0) = S_0 & \text{pour la moitié des variables d'état} \\ X_i(1) = S_1 & \text{pour l'autre moitié.} \end{cases}$$

Enfin, nous ramènerons l'ensemble du problème à une forme classique, en posant |4| :

$x_{p+1} = \frac{1}{2} \int_0^x u^2(x)\ dx$ avec $x_{p+1}(0) = 0$ et en rajoutant l'équation d'état :

$$\dot{x}_{p+1} = \frac{1}{2}\ u^2$$

avec un critère $J_1 = \sum_{n=1}^{N} a_n\ x_n(1) + x_{p+1}(1)$ à minimiser

La résolution est maintenant connue |4|

On définit un vecteur adjoint $\underline{z}$ et un Hamiltonien :

$$H = \sum_{i=1}^{p} z_i \, F_i(\underline{x},u) + \frac{1}{2} z_{p+1} \, u^2$$

Le système adjoint est obtenu immédiatement à l'aide de la relation : $\dot{\underline{z}} = \frac{-\partial H}{\partial \underline{x}}$

Selon le principe de Pontryagin, H doit être minimum en u à l'optimum, ce qui nous donne :

$u^* = \frac{CL(\underline{z})}{z_{p+1}}$ ou $CL(\underline{z})$ représente une combinaison linéaire de certains des z_i.

En remplaçant u^* par sa valeur dans le système d'état et le système adjoint, on obtient :

(4128) $\left|\begin{matrix}\dot{\underline{X}} \\ \dot{\underline{Z}}\end{matrix}\right| = \underline{G}(\underline{X},\underline{Z})$ avec des conditions aux deux bouts sur $\underline{X}$ et $\underline{Z}$.

Les conditions de transversalité et la nature du problème d'optimisation posé (choix de certaines valeurs initiales sur $\underline{X}$, et certains points finaux fixés) donnent des conditions aux limites sur $\underline{z}$ du type :

$$z_j(1) = a_j(\text{ou } 0) \qquad \text{et} \quad z_j(0) = 0$$

Ce problème classique peut être résolu par plusieurs méthodes numériques [Cf Annexe IV a] adaptées à chaque cas particulier (Riccati, exponentielle de matrice, Méthodes de tir, etc...). Généralement, u sera soumis à des contraintes, mais cela ne présente guère de difficultés supplémentaires.

Une fois le système (4128) résolu, on repassera à $g^i(x,\rho)$ et $\theta(x,\rho)$ au moyen des relations (4123) et (4124) et à la commande u^* à partir du vecteur adjoint.

Nous avons obtenu la commande optimale $\theta_p^*(x)$, et les profils correspondants, en température et en concentrations, du moins théoriquement : l'exposé général de la méthode est terminé ; celle-ci peut donc être résumée par les trois points *"clés"* suivants :

- Transformation intégrale du système aux dérivées partielles, et de ses conditions aux limites axiales.

- Expression des seconds membres et du critère à minimiser en fonction des grandeurs transformées.

- Utilisation du principe du maximum de Pontryagin.

Cependant, tout n'est pas aussi simple que cela, et la formulation complète du processus d'optimisation pose un certain nombre de problèmes, parfois difficiles à résoudre. Nous allons pouvoir en juger dans la suite, qui appliquera en detail la procédure précédente au cas du réacteur dont la simulation a été effectuée dans la troisième partie.

IV.II - TRAITEMENT THEORIQUE D'UN MODELE COMPLEXE -

Rappelons encore une fois les équations sur lesquelles nous allons travailler :

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{\beta_r}\dfrac{\partial g}{\partial x} + \dfrac{\beta_L}{\beta_r}\dfrac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\dfrac{\partial g}{\partial \rho}\right) = \dfrac{1}{\beta_r}\Psi(g,\theta) & (4201) \\ \dfrac{1}{\alpha_r}\dfrac{\partial \theta}{\partial x} + \dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\dfrac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\dfrac{\partial \theta}{\partial \rho}\right) = \dfrac{A}{\alpha_r}\Psi(g,\theta) & (4202) \end{cases}$$

avec :

pour $\rho = 0$ $\quad \dfrac{\partial g}{\partial \rho} = \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = 0$ (4203) (4204)

pour $\rho = 1$ $\quad \dfrac{\partial g}{\partial \rho} = 0 \quad ; \quad \dfrac{\partial \theta}{\partial \rho} = -Bi(\theta-\theta_p)$ (4205) (4206)

pour $x = 0$ $\quad \dfrac{\partial g}{\partial x} = \dfrac{1}{\beta_L}(g-1) \; ; \; \dfrac{\partial \theta}{\partial x} = \dfrac{\theta}{\alpha_L}$ (4207) (4208)

pour $x = \bar{x}$ $\quad \dfrac{\partial g}{\partial x} = \dfrac{\partial \theta}{\partial x} = 0$ (4209) (4210)

Les opérateurs intégraux sont les mêmes que dans le Chapitre III ; seul change le terme résiduel (obtenu après intégration par parties) de l'équation (4202). Au lieu d'être nul, il vaut :

$$E_5 = \sigma_m \rho \left(\hat{L}_m \frac{\partial \theta}{\partial \rho} - \theta \frac{\partial \hat{L}_m}{\partial \rho}\right)\Bigg|_0^1 = \frac{2Bi}{\left(1 + \dfrac{Bi^2}{\nu_m^2}\right) J_0(\nu_m)}\,\theta_p(x)$$

ainsi que nous l'avons montré dans le paragraphe précédent.

Globalement, le système transformé s'écrira donc :

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{\beta_r}\dfrac{d\bar{g}_n(x)}{dx} + \dfrac{\beta_L}{\beta_r}\dfrac{d^2\bar{g}_n(x)}{dx^2} - \lambda_n^2 \bar{g}_n(x) = \bar{\Psi}_n(x) \qquad \forall n = 1, 2 \ldots \infty & (420\ A) \\ -\dfrac{1}{\alpha_r}\dfrac{d\bar{\theta}_m(x)}{dx} + \dfrac{\alpha_L}{\alpha_r}\dfrac{d^2\bar{\theta}_m(x)}{dx^2} - \nu_m^2\,\bar{\theta}_m(x) = \bar{\Phi}_m(x) - h_m\theta_p(x) & (420\ B) \end{cases}$$

$$\forall m = 1,2\ldots\infty$$

avec : pour $x = 0$

$$\frac{d\bar{g}_n(x)}{dx} = \frac{1}{\beta_L}(\bar{g}_n(x) - \delta_{1n}) \qquad (420\ C)$$

$$\frac{d\bar{\theta}_m(x)}{dx} = \frac{1}{\alpha_L}\,\bar{\theta}_m(x) \qquad (420\ D)$$

pour $x = \bar{x}$

$$\frac{d\bar{g}_n(x)}{dx} = 0 \qquad (420\ E)$$

$$\frac{d\bar{\theta}_m(x)}{dx} = 0 \qquad (420\ F)$$

Ces équations sont obtenues aisément à l'aide de la méthode décrite dans la troisième partie ; les grandeurs utilisées sont définies ainsi :

$$\left|\begin{array}{l} \bar{g}_n(x) = \int_0^1 g(\rho,x)\ K(\rho,n)\ d\rho \\ \bar{\Psi}_n(x) = \frac{1}{\beta_r}\int_0^1 \Psi(g,\theta)\ K(\rho,n)\ d\rho \\ \bar{\theta}_n(x) = \int_0^1 \theta(\rho,x)\ L(\rho,m)\ d\rho \\ \bar{\Phi}_m(x) = \frac{A}{\alpha_r}\int_0^1 \quad (g,\theta)\ L(\rho,m)\ d\rho \end{array}\right. \qquad (420\ G)$$

avec

$$\left|\begin{array}{l} K(\rho,n) = \frac{2}{J_o^2(\lambda_n)}\ \rho\ J_o(\lambda_n\rho) \\ L(\rho,m) = \frac{2}{\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o^2(\nu_m)}\ J_o(\nu_m\rho) \\ h_m \quad \frac{2Bi}{\left[1 + \frac{Bi^2}{\nu_m^2}\right] J_o(\nu_m)} \end{array}\right. \qquad (420\ H)$$

$$\left|\begin{array}{l} \lambda_n \text{ solution de : } \lambda J_1(\lambda) = 0 \\ \nu_m \text{ solution de : } \nu J_1(\nu) - Bi J_0(\nu) = 0 \\ \delta_{1n} = 0 \text{ pour } n \neq 1 \text{ et } = 1 \text{ pour } n = 1 \end{array}\right. \qquad (420\ I)$$

IV.II.1 - <u>Choix du critère</u>

Le problème ayant été formulé en fonction de la grandeur de commande $\theta_p(x)$, il faut lui adjoindre un critère d'optimisation faisant intervenir les grandeurs transformées et la commande en température.

Ici, il n'y a que deux produits en présence : A (concentration g) $\rightleftarrows$ B (concentration (1-g)). Il faut naturellement maximiser la concentration du produit B à la sortie ; c'est-à-dire minimiser g pour la valeur $x = \bar{x}$. D'où le critère $J_1 = \int_0^1 g(\rho,\bar{x})d\rho$.

Nous rajouterons à cette expression un terme dit *"économique"*. En effet, si l'on admet que le coût de chauffage croît avec la température, il conviendra de minimiser également l'intégrale $J_2 = \int_0^{\bar{x}} \frac{1}{2}\,\theta_p^2(x)dx$.

Le critère global s'écrira donc :

$$J = \int_0^1 g(\rho,\bar{x})\ d\rho + P\,\frac{1}{2}\int_0^{\bar{x}} \theta_p^2(x)\ dx,$$

P étant un coefficient de pondération.

Il faut maintenant exprimer J en fonction de la concentration transformée. Ceci revient à exprimer J_1 en fonction de $\bar{g}_n(\bar{x})$

Sachant que $g(\rho,\bar{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(\bar{x})\ J_0(\lambda_n\rho)$, J_1 s'écrit immédiatement :

$$J_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(x) \int_0^1 J_0(\lambda_n\rho)\ d\rho$$

Les intégrales $\int_0^1 J_o(\lambda_n\rho)d\rho = \frac{1}{\lambda_n}\int_0^{\lambda_n} J_0(r)dr$ sont une suite de nombres positifs α_n.

Nous pourrons donc finalement utiliser le critère :

$$\boxed{J = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n\ \bar{g}_n(\bar{x}) + \frac{P}{2}\int_0^{\bar{x}} \theta_p^2(x)\ dx} \qquad (4211)$$

IV-II-2 - <u>Présentation du ppoblème sous forme d'équations d'état</u>

Effectuons les changements de fonctions suivants :

$$\begin{cases} x_n^1 = \bar{g}_n & \forall n \\ x_n^2 = \dot{\bar{g}}_n & \forall n \end{cases} \qquad \begin{cases} y_m^1 = \bar{\theta}_m & \forall n \\ y_m^2 = \dot{\bar{\theta}}_m & \forall m \end{cases}$$

Les équations |420 A||420 B||420 C||420 D||420 E||420 F| prennent ainsi la forme suivante :

$$\begin{cases} \dot{x}_n^1 = x_n^2 & (4221) \\ \dot{x}_n^2 = \frac{\beta_r}{\beta_L} (\lambda_n)^2 x_n^1 + \frac{1}{\beta_L} x_n^2 + \frac{\beta_r}{\beta_L} \bar{\Psi}_n & (4222) \\ \dot{y}_m^1 = y_m^2 & (4223) \\ \dot{y}_m^2 = \frac{\alpha_r}{\alpha_L} (\nu_m)^2 y_m^1 + \frac{1}{\alpha_L} y_m^2 + \frac{\alpha_r}{\alpha_L} \bar{\Phi}_m - \frac{\alpha_r}{\alpha_L} h_m \theta_p(t) & (4224) \end{cases}$$

avec les conditions initiales :

$$\begin{cases} x_n^2 = \dot{x}_n^1 = \frac{1}{\beta_L} (x_n^1 - \delta_{1n}) \text{ pour } t = 0 & (4225) \\ y_m^2 = \dot{y}_m^1 = \frac{1}{L} y_m^1 \quad \text{pour } t = 0 & (4226) \end{cases}$$

et les conditions finales :

$$\begin{cases} x_n^2 = \dot{x}_n^1 = 0 \quad \text{pour } t = T & (4227) \\ y_m^2 = \dot{y}_m^1 = 0 \quad \text{pour } t = T & (4228) \end{cases}$$

Remarquons que ces équations sont valables pour toutes valeurs de n et de m, et que, pour éviter toute confusion avec les variables d'état, nous avons changé la variable axiale $x \in [0, \bar{x}]$ en $t \in [0,T]$

Nous constatons, en outre, que les conditions initiales sont des combinaisons de deux variables d'état, respectivement x_n^1 , x_n^2 , et y_m^1 , y_m^2.

Effectuons donc les nouveaux changements de variables d'état :

$$\begin{cases} x_n^3 = x_n^2 - \frac{1}{\beta_L} x_n^1 & (4229) \\ y_m^3 = y_m^2 - \frac{1}{\alpha_L} y_m^1 & (422\ A) \end{cases}$$

Dans ces conditions, il sera possible d'écrire le modèle d'état sous une forme plus classique :

$$\begin{cases} \dot{x}_n^2 = a_n^1 x_n^2 + a_n^2 x_n^3 + f_n^1 & B \\ \dot{x}_n^3 = -a_n^2 (x_n^2 - x_n^3) + f_n^1 & C \\ \dot{y}_m = A_m^1 y_m^2 + A_m^2 y_m^3 + f_m^2 + b_m u & D \\ \dot{y}_m^3 = -A_m^2 (y_m^2 - y_m^3) + f_m^2 + b_m u & E \end{cases} \quad (422)$$

$$\forall n \ , \ \forall m$$

avec les conditions initiales :

$$\begin{cases} x_n^3(0) = X_o^n & (422\ F) \\ y_m^3(0) = 0 & (422\ G) \end{cases} \qquad \forall n,\ m$$

et les conditions finales :

$$\begin{cases} x_n^2(T) = 0 & (422\ H) \\ y_m^2(T) = 0 & (422\ I) \end{cases} \qquad \forall n,\ m$$

Pour obtenir ce modèle, nous avons supprimé les variables x_n^1 et y_m^1, devenues superflues, et nous avons défini les grandeurs suivantes :

$$\begin{cases} a_n^1 = \beta_r\ \lambda_n^2 + \dfrac{1}{\beta_L}\ ;\quad a_n = -\beta_r\lambda_n^2\ ;\quad X_0^n = -\dfrac{1}{\beta_L}\ \delta_{1n} \\ x_n^2 = \bar{g}_n\ ;\ x_n = \dot{\bar{g}}_n - \dfrac{1}{\beta_L}\ \bar{g}_n\ ,\ \text{c'est-à-dire :}\ \bar{g}_n = \beta_L(x_n^2 - x_n^3) \\ f_n^1 = \dfrac{\beta_r}{\beta_L}\ \bar{\Psi}_n \\ A_m^1 = \alpha_r\ \nu_m^2 + \dfrac{1}{\alpha_L}\ ;\ A_m^2 = -\alpha_r\nu_m^2\ ;\ b_m = -\dfrac{\alpha_r}{\alpha_L}\ h_m \\ y_m^2 = \dot{\bar{\theta}}_m\ ;\ y_m^3 = \dot{\bar{\theta}}_m - \dfrac{1}{\alpha_L}\ \bar{\theta}_m\ ,\ \text{c'est-à-dire :}\ \bar{\theta}_m = \alpha_L(y_m^2 - y_m^3) \\ u(t) = \theta_p(t)\ ;\quad f_m^2 = \dfrac{\alpha_r}{\alpha_L}\ \bar{\Phi}_m \end{cases} \qquad (422\ J)$$

Enfin, il est nécessaire d'exprimer le critère J en fonction des nouvelles variables d'état.

Nous savons que $\bar{g}_n = \beta_L(x_n^2 - x_n^3)$. Afin d'obtenir J sous forme d'une combinaison linéaire, on pose $w = \frac{1}{2}\int_0^t \theta_p(x)dx$, avec $w(0)=0$

Le critère s'écrira donc :

$$J = \beta_L \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n\left[x_n^2(T) - x_n^3(T)\right] + Pw(T)$$

Sachant, d'après (422 H) que $x_n^2(T) = 0\ \ \forall n$, il reste tout simplement :

(422 K) $$J = -\beta_L \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n x_n^3(T) + Pw(T)$$, à condition de rajouter au système l'équation d'état :

$$\dot{w} = \frac{1}{2}\ u^2 \quad \text{avec } w(0) = 0 \qquad (422\ L)$$

Il est temps, maintenant, de définir un ordre de troncation pour les sommes infinies ; soit N cet ordre, identique pour les deux indices n et m. A ce stade, nous avons donc un modèle d'état comportant $2N + 2N + 1 = 4N + 1$ équations ; les conditions initiales sont au nombre de $2N + 1$ et les conditions finales au nombre de 2N. Le critère porte sur $(N + 1)$ variables, et est une combinaison linéaire de leurs valeurs finales. La fonction de commande, u(t) est monodimensionnelle et est présente sous forme linéaire dans 2N équations, sous forme parabolique dans la dernière. Enfin, 4N équations d'état comportent un terme non linéaire dont il faut préciser l'expression analytique.

Munis de tous ces éléments, il nous est maintenant possible d'aborder la partie *"optimisation"*. Remarquons auparavant que, si l'on connaissait l'expression de u(t), et si l'on désirait effectuer seulement une simulation, le modèle d'état auquel nous sommes parvenus paraît moins adapté à un traitement numérique que le système utilisé dans la troisième partie, que u(t) soit nul ou non. En effet, les fonctions de Green n'apparaissent pas, et l'intégration du système à valeurs limites aux deux extrêmités doit être faite numériquement. C'est pourquoi il nous semble que cette présentation du problème ne peut être utile que pour formuler de façon classique le problème d'optimisation.

IV-II-3 - Application du Principe du Maximum

Définissons tout d'abord un vecteur adjoint $\underline{z}$; sa correspondance avec les variables d'état s'établit ainsi :

$$\underline{z} = \left| \begin{array}{c} z_n^2 \\ \vdots \\ z_n^3 \\ \vdots \\ z_m'^2 \\ \vdots \\ z_m'^3 \\ \vdots \\ Z \end{array} \right| \forall n, m = 1, 2 \ldots N \qquad \left[\begin{array}{lll} z_n^2 \longleftrightarrow x_n^2 , & \forall n = 1,N \ldots\rangle & H_1 \\ z_n^3 \longleftrightarrow x_n^3 , & \forall n = \text{"} \ldots\rangle & H_2 \\ z'^2_m \longleftrightarrow y_m^2 , & \forall m = \text{"} \ldots\rangle & H_3 \\ z'^3_m \longleftrightarrow y_m^3 , & \forall m = \text{"} \ldots\rangle & H_4 \\ Z \longleftrightarrow W & \ldots\ldots\ldots\ldots\rangle & H_5 \end{array} \right.$$

(Hamiltoniens)

Soit maintenant l'Hamiltonien $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{5} H_i = \underline{z}^T \underline{F}$$

avec :

$$\left[\begin{array}{l} H_1 = \sum_{j=1}^{N} (a_j^1 x_j^2 + a_j^2 x_j^3 + f_j^1)\, z_j^2 \\ H_2 = \sum_{j=1}^{N} [-a_j^2 (x_j^2 - x_j^3) + f_j^1]\, z_j^3 \\ H_3 = \sum_{j=1}^{N} [A_j^1 y_j + A_j^2 y_j + f_j^2 + b_j u]\, z_j'^2 \\ H_4 = \sum_{j=1}^{N} [-A_j^2 (y_j^2 - y_j^3) + f_j^2 + b_j u]\, z_j'^3 \\ H_5 = \frac{1}{2}(u)^2 Z \end{array}\right. \qquad (4231)$$

Le système adjoint sera obtenu par la relation $\dot{\underline{z}} = -\frac{\partial H}{\partial \underline{x}}$, c'est-à-dire, $\forall n$ et $m \in [1,N]$:

$$\left[\begin{array}{l} \dot{z}_n^2 = -\left[a_n^1 z_n^2 - a_n^2 z_n^3 + \sum_{j=1}^{N} (z_j^2 + z_j^3) \frac{\partial f_j^1}{\partial x_n^2} + \sum_{j=1}^{N} (z_j'^2 + z_j'^3) \frac{\partial f_j^2}{\partial x_n^2}\right] \\ \dot{z}_n^3 = -\left[a_n^2 z_n^2 + a_n^2 z_n^3 + \sum_{j=1}^{N} (z_j^2 + z_j^3) \frac{\partial f_j^1}{\partial x_n^3} + \sum_{j=1}^{N} (z_j'^2 + z_j'^3) \frac{\partial f_j^2}{\partial x_n^3}\right] \\ \dot{z}_m'^2 = -\left[A_m^1 z_m'^2 - A_m^2 z_m'^3 + \sum_{j=1}^{N} (z_j^2 + z_j^3) \frac{\partial f_j^1}{\partial y_m^2} + \sum_{j=1}^{N} (z_j'^2 + z_j'^3) \frac{\partial f_j^2}{\partial y_m^2}\right] \\ \dot{z}_m'^3 = -\left[A_m^2 z_m'^2 + A_m^2 z_m'^3 + \sum_{j=1}^{N} (z_j^2 + z_j^3) \frac{\partial f_j^1}{\partial y_m^3} + \sum_{j=1}^{N} (z_j'^2 + z_j'^3) \frac{\partial f_j^2}{\partial y_m^3}\right] \\ \dot{Z} = -\frac{\partial H}{\partial W} = 0 \end{array}\right. \qquad (4232)$$

La dernière équation donne $Z(t) = C^{te} = Z(T) = P$, $\forall t$ (Le coefficient P provient du paramètre affecté à la variable d'état W dans le critère J, pour $t = T$)

d'où $H_5 = \frac{1}{2}(u)^2 P$

Le principe de Pontryagin va nous permettre maintenant de trouver la commande optimale : pour $u = u^*$, nous avons H minimum $\Rightarrow \frac{\partial H}{\partial u^*} = 0$

$$\sum_{j=1}^{N} b_j z_j'^2 + \sum_{j=1}^{N} b_j z_j'^3 + P u^* = 0$$

d'où $$u^* = -\frac{1}{P}\sum_{j=1}^{n} b_j(z_j'^2 + z_j'^3) \qquad (4233)$$

Enfin, il nous reste à préciser les conditions aux limites sur le système adjoint (4232), et à expliciter les fonction f_n^1 et f_m^2.

L'aspect théorique de ce problème d'optimisation étant relativement simple, les conditions aux limites sur $\underline{z}$ sont obtenues immédiatement |4| :

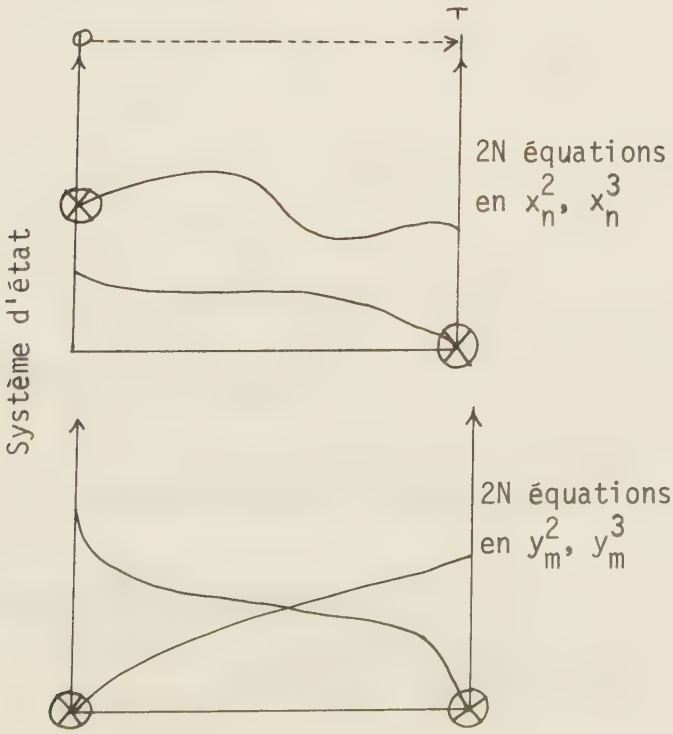
$$\begin{cases} z_n^3(T) = -\beta_L \alpha_n & \forall n = 1, 2 \ldots N \quad (4234) \\ z_m'^3(T) = 0 & \forall m = 1, 2 \ldots N \quad (4235) \end{cases}$$

Ces deux conditions proviennent du critère J, et du fait que les variables d'état correspondant aux z_n^3 et z'^3_m ne possèdent que des conditions initiales (422 F),(422 G)

$$\begin{cases} z_n^2(0) = 0 & \forall n = 1, 2 \ldots N \quad (4236) \\ z_m'^2(0) = 0 & \forall m = 1, 2 \ldots N \quad (4237) \end{cases}$$

Ces équations découlent de l'absence de conditions initiales sur x_n^2 et y_m^2, les valeurs finales de ces variables étant par ailleurs fixées (422 H), (422 I)

A ce stade, il semble utile d'effectuer une synthèse *"locale"* des équations en présence. Pour cela, nous représenterons les trajectoires des variables d'état et ses variables adjointes sur les schémas ci-dessous, en indiquant les conditions aux limites par un " ⊗ "



Equations en x

$$\begin{cases} \dot{x}_n^2 = a_n^1 x_n^2 + a_n^2 x_n^3 + f_n^1 \\ \dot{x}_n^3 = -a_n^2(x_n^2 - x_n^3) + f_n \end{cases}$$

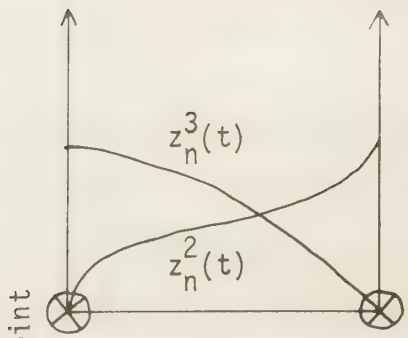
$\forall n = 1,2 \ldots N$

Equations en y

$$\begin{cases} \dot{y}_m^2 = A_m^1 y_m^2 + A_m^2 y_m^3 + f_m^2 + b_m u \\ \dot{y}_m^3 = -A_m^2(y_m^2 - y_m^3) + f_m^2 + b_m u \end{cases}$$

$\forall m = 1,2 \ldots N$

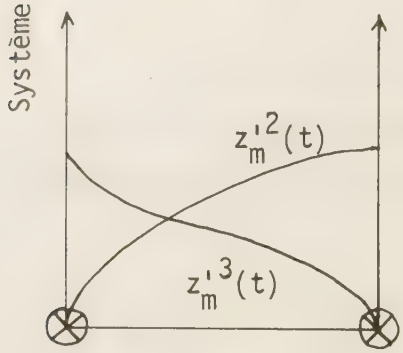
Equations en z



2N équations en z_n^2, z_n^3 $\begin{cases} \dot{z}_n^2 = \dots \\ \dot{z}_n^3 = \dots \end{cases}$ (équations(4232))

$\forall n = 1, 2 \dots N$

Système adjoint



2N équations en $z_m'^2$, $z_m'^3$ $\begin{cases} \dot{z}_m'^2 = \dots \\ \dot{z}_m'^3 = \dots \end{cases}$ (équations(4232))

$\forall m = 1, 2 \dots N$

Enfin, pour le dernier état W, et son adjoint Z, nous avons :

$$z(t) = p$$

IV-II-4 - Transformation de la loi de vitesse

Les fonctions f_n^1 et f_m^2 sont données par les relations :

$$f_n^1 = \frac{\beta_r}{\beta_L} \bar{\Psi}_n \quad \text{et} \quad f_m^2 = \frac{\alpha_r}{\alpha_L} \bar{\Phi}_m$$

avec
$$\begin{cases} \bar{\Psi}_n = \dfrac{1}{\beta_r} \displaystyle\int_0^1 \Psi(g,\theta) \frac{2}{J_0^2(\lambda_n)} \rho J_0(\lambda_n \rho)\, d\rho & (4241) \\ \bar{\Phi}_m = \dfrac{A}{\alpha_r} \displaystyle\int_0^1 \Psi(g,\theta) \frac{2}{\left[1 + \frac{\beta_1^2}{\nu_m^2}\right] J_0^2(\nu_m)} \rho J_0(\nu_m \rho)\, d\rho & (4242) \end{cases}$$

(cf (420 G) et (420 H))

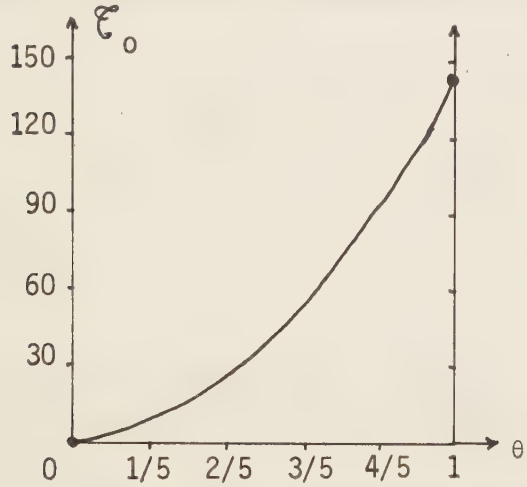
et $\Psi(g,\theta) = g e^{\frac{q_0 \theta}{1+\theta}} - \overleftarrow{k}\,(1-g)^{\frac{q_1 \theta}{1+\theta}}$ (4243), où $\overleftarrow{k}$ est une constante définie à la fin du chapitre I.

Nous devons obtenir f_n^1 et f_m^2 en fonction des transformées, $\bar{g}_n$ et $\bar{\theta}_m$, ce qui est, dans ce cas, impossible directement.

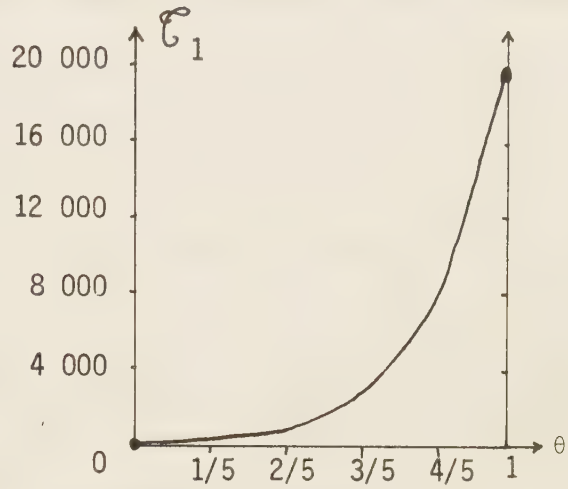
Pour cette raison, il nous faut tout d'abord prendre une approximation des termes exponentiels :

$$\mathcal{E}_0 = e^{\frac{q_0\theta}{1+\theta}} \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_1 = e^{\frac{q_1\theta}{1+\theta}}$$

Dans le domaine de température considéré, et compte tenu des valeurs numériques prises par q, les deux termes $\mathcal{E}$ ont les allures suivantes :



et



Dans notre cas ($q_1 = 20$, $q_0 = 10$), la deuxième courbe est le carré de la première. On constate que de telles fonctions peuvent être approximées par les polynômes. Si la première, $\mathcal{E}_0$ est donnée par une parabole $a_0\theta^2 + b_0\theta + c_0$, la seconde τ_1 vaudra $(a_0\theta^2 + b_0\theta + c_0)^2$. Cependant, pour alléger les calculs, nous poserons :

$$\begin{cases} \mathcal{E}_0 = a_0\theta^2 + b_0\theta + c_0 \\ \mathcal{E}_1 = a_1\theta^2 + b_1\theta + c_1 \end{cases}$$

Ψ s'écrira alors :

$$\begin{aligned} \Psi(g,\theta) = {} & g\theta^2 (a_0 + \overleftarrow{k}\, a_1) - \overleftarrow{k}\, a_1\theta^2 \\ & + g\theta(b_0 + \overleftarrow{k}\, b_1) - \overleftarrow{k}\, b_1\theta \\ & + g\,(C_0 + \overleftarrow{k}\, C_1 - \overleftarrow{k} C_1 \end{aligned} \qquad (4245)$$

Nous savons d'autre part que :

$$\begin{cases} g = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n(x)\, J_0(\lambda_n \rho) \\ \theta = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{\theta}_m(x)\, J_0(\nu_m \rho) \end{cases}$$

En remplaçant g et θ par leurs expressions ci-dessus dans la relation (4245), tous les termes obtenus sont de la forme $y_1(x)\ y_2(\rho)$. Il est donc possible d'appliquer la transformation intégrale à cette nouvelle expression de Ψ.

Les calculs étant longs et fastidieux, nous nous contenterons de donner les résultats obtenus :

$$\bar{\Psi}_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \bar{g}_k\ \bar{\theta}_i^2\ a^n_{i,k,i} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{i=2 \\ (i>j)}}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} a^n_{i,k,j} \bar{g}_k\ \bar{\theta}_i\ \bar{\theta}_j$$

$$- 2 \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\theta}_j\ \bar{\theta}_j\ b^n_{ij} - \sum_{i=1}^{\infty} \bar{\theta}_i^2\ b^n_{ii} + \sum_{K=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} C^n_{ik}\ \bar{\theta}_i\ \bar{g}_k$$

$$- \sum_{i=1}^{\infty} d^n_i\ \bar{\theta}_i + (C_0 + \overleftarrow{k}C_1)\ \bar{g}_n - f'_n \qquad (4246)$$

avec :

$$a^n_{i,k,i} = (a_0+\overleftarrow{k}a_1) \int_0^1 \rho\mu_n J_0(\lambda_n\rho)J_0(\lambda_k\rho)J_0(\nu_i\rho)d\rho$$

$$a^n_{i,k,j} = (a_0+\overleftarrow{k}a_1) \int_0^1 \rho\mu_n J_0(\lambda_n\rho)J_0(\lambda_k\rho)J_0(\nu_i\rho)J_0(\nu_j\rho)d\rho$$

$$b^n_{ii} = \int_0^1 \overleftarrow{k}a_1\mu_n\rho J_0^2(\nu_i\rho)J_0(\lambda_n\rho)d\rho$$

$$b^n_{ij} = \int_0^1 \overleftarrow{k}a_1\mu_n\rho J_0(\lambda_n\rho)J_0(\nu_i\rho)J_0(\nu_j\rho)d\rho$$

$$C^n_{ik} = (b_0+\overleftarrow{k}b_1) \int_0^1 \mu_n\rho J_0(\lambda_n\rho)J_0(\lambda_k\rho)J_0(\lambda_i\rho)d\rho$$

$$d^n_i = \overleftarrow{k}b_1 \int_0^1 \rho\mu_n J_0(\nu_i\rho)J_0(\lambda_n\rho)d\rho$$

$$f'_n = \int_0^1 \overleftarrow{k}\ C_1\rho\mu_n J_0(\lambda_n\rho)d\rho = \overleftarrow{k}\ C_1\ \delta_{1n}$$

(On obtient des relations similaires pour $\bar{\Phi}_m(x)$)

Le nombre de termes entrant dans l'expression de $\bar{\psi}_n(x)$ vaut $\mathcal{N} = \frac{N(N^2+3)}{2} + 2(N^2+1)$, si N est l'ordre de troncation, c'est-à-dire le nombre de valeurs propres.

En simulation, nous avons vu qu'à la rigueur deux valeurs propres pouvaient suffire. D'où $\mathcal{N} = 17$. Cependant, rien ne prouve que dans ce problème d'optimisation, il ne soit pas nécessaire de prendre N = 5, 10 ou même des valeurs supérieures. Ceci conduirait aux valeurs :

$\mathcal{N} = 122$ pour $N = 5$
$\mathcal{N} = 717$ pour $N = 10$

Nous touchons là une question importante : il semble en effet difficile de calculer à chaque itération, pour chaque $\bar{\Psi}_n$ et pour chaque Φ_m, plusieurs centaines de grandeurs ou de coefficients. Cependant, nous traiterons de ce type de problèmes un peu plus loin ; pour l'instant, contentons-nous de cette remarque, et terminons la description des calculs.

Il nous reste à exprimer $\bar{\psi}_m$ et $\bar{\Phi}_m$, donc f_n^1 et f_m^2 en fonction des variables d'état. Ceci se fait immédiatement en remplaçant $\bar{g}_n$ et $\bar{\theta}_m$ par les expressions :

$$\begin{aligned} \bar{g}_n &= \beta_L(x_n^2 - x_n^3) \\ \bar{\theta}_m &= \alpha_L(y_m^2 - y_m^3) \end{aligned} \qquad (422\ J)$$

Nous parvenons donc bien à une expression de f_n^1 et f_m^2 qui contient <u>explicitement</u> les variables d'état ; ainsi, il est possible d'obtenir les expressions analytiques des grandeurs $\frac{\partial f}{\partial x}$. Celles-ci seront relativement plus simples que les relations du type (4246). Citons, par exemple :

$$\frac{\partial f_n^1}{\partial x_n^2} = \beta_r \left[\alpha_L^2 \left(\sum_i (y_i^2 - y_i^3)^2 a_{i,n,i}^n + 2 \sum_i \sum_{\substack{j \\ i>j}} (y_j^2 - y_j^3)(y_i^2 - y_i^3) a_{i,n,j}^n \right) + \alpha_L \sum_i C_{i,n}^n (y_i^2 - y_i^3) + C_0 + \overleftarrow{k} C_1 \right] \qquad (4248)$$

Cette relation n'est cependant pas exempte d'une certaine lourdeur, qui en rend malaisée l'utilisation.

IV-II-5 - <u>Problèmes numériques</u>

Au stade auquel nous sommes parvenus, on peut constater que l'ensemble des éléments nécessaires à une formulation correcte du problème a été présenté ; il est temps maintenant d'en faire une synthèse et de proposer une procédure de traitement numérique.

Effectuons préalablement une modification dans l'ordre de présentation des équations (422) B, C, D, E et (4232) selon le processus :

$$
\begin{array}{l|l||l|l}
x_1^3 \longleftrightarrow X_1 & x_1^2 \longleftrightarrow X_{2N+1} & z_1^3 \longleftrightarrow Z_1 & z_1^2 \longleftrightarrow Z_{2N+1} \\
x_2^3 \longleftrightarrow X_2 & x_2^2 \longleftrightarrow X_{2N+2} & z_2^3 \longleftrightarrow Z_2 & z_2^2 \longleftrightarrow Z_{2N+2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
x_N^3 \longleftrightarrow X_N & x_N^2 \longleftrightarrow X_{3N} & z_N^3 \longleftrightarrow Z_N & z_N^2 \longleftrightarrow Z_{3N} \\
y_1^3 \longleftrightarrow X_{N+1} & y_1^2 \longleftrightarrow X_{3N+1} & z_1'^3 \longleftrightarrow Z_{N+1} & z_1'^2 \longleftrightarrow Z_{3N+1} \\
y_2^3 \longleftrightarrow X_{N+2} & y_2^2 \longleftrightarrow X_{3N+2} & z_2'^3 \longleftrightarrow Z_{N+2} & z_2'^2 \longleftrightarrow Z_{3N+2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
y_N^3 \longleftrightarrow X_{2N} & y_N^2 \longleftrightarrow X_{4N} & z_N'^3 \longleftrightarrow Z_{2N} & z_N'^2 \longleftrightarrow Z_{4N}
\end{array}
$$

Nous disposons alors du système suivant :

$$
\dot{\underline{X}} = F(X,u) \text{ avec les conditions aux limites connues : } \quad (4251) \quad \begin{cases} X_i(0) \text{ pour } i = 1,2\ldots 2N \\ X_i(T) \text{ pour } i = 2N+1\ldots 4N \\ Z_i(T) \text{ pour } i = 1,2\ldots 2N \\ Z_i(0) \text{ pour } i = 2N+1\ldots 4N \end{cases}
$$

Remarquons que u n'est présent que dans les 2N équations d'état numérotées de N+2 à 2N et de 3N+2 à 4N.

Nous connaissons d'autre part l'expression de u^* (4233), que l'on peut reporter dans l'expression de $\dot{\underline{X}}$. Le système différentiel à intégrer est donc :

$$
(4252) \qquad \begin{cases} \dot{\underline{X}} = F^*(X,Z) \\ \dot{\underline{Z}} = G(X,Z) \end{cases} \quad \text{avec les conditions (4251)}
$$

Le dernière variable d'état ne figure pas dans ces équations, car elle n'est d'aucune utilité.

Le système $\begin{matrix}(4252)\\(4251)\end{matrix}$ peut également être écrit de manière détaillée et complète, à l'aide des équations : ((422) : B,C,D,E,F,G,H,I), (4232), (4233), (4234), (4235), (4236), (4237), (4246), (4247), (4248). Nous ne le ferons cependant pas, afin de ne pas charger inutilement l'exposé.

Il faut maintenant adopter une méthode numérique d'intégration*; pour cela, considérons le système (4252) ; nous pouvons faire à son sujet les remarques suivantes :

* Nous renvoyons à l'Annexe IV a en ce qui concerne les procédures habituelles d'intégration de tels systèmes.

- sa dimension est 8N, si N est le nombre de valeurs propres à retenir nombre inconnu a priori.
- le système en $\dot{\underline{X}}$ est non linéaire, à cause de l'approximation parabolique de la loi cinétique.
- le système en $\dot{\underline{Z}}$ est linéaire par rapport à $\underline{Z}$, et peut être intégré séparément, par des méthodes classiques, si $\underline{X}$ est connu (cf Annexe IV a).
- les systèmes en $\dot{\underline{X}}$ et $\dot{\underline{Z}}$ sont tous deux à valeurs limites en deux points.

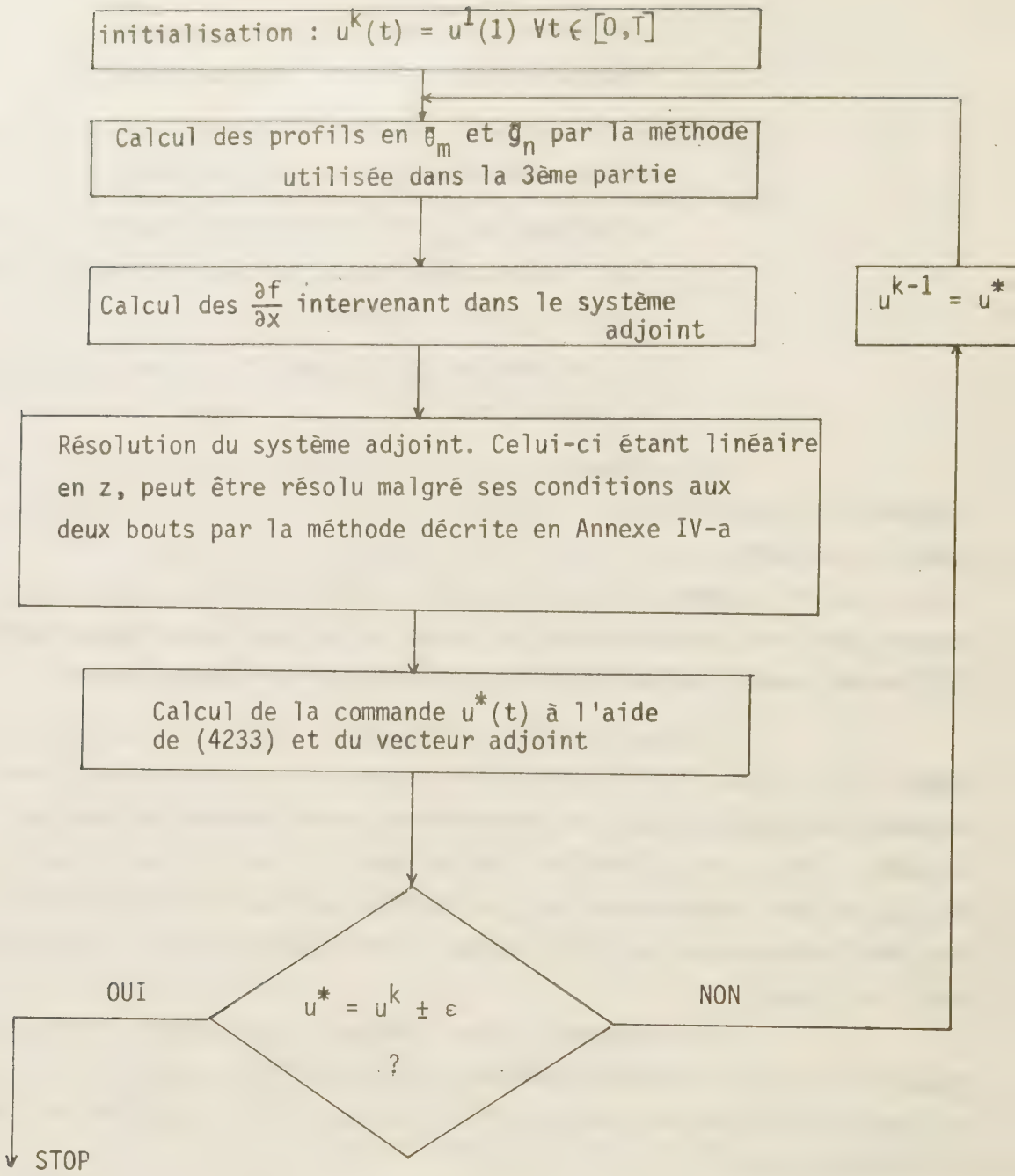
Le problème revient donc à intégrer numériquement un système différentiel globalement non linéaire, à valeurs limites aux deux bouts, et de dimension au moins égale à 16, vraisemblablement de l'ordre de 40 à 80. Ajoutons à cela que les seconds membres du système comportent des expressions relativement longues, avec de grandes séries de termes à calculer pour chaque valeur de r. (122 termes pour 5 valeurs propres, et 717 pour 10 valeurs propres).

L'intégration d'un tel système nécessite l'utilisation de méthodes de tir. Dans l'état actuel des choses, il est probable que même les méthodes les plus évoluées ne permettront pas de trouver la solution. En effet, le nombre d'équations à traiter simultanément introduira des erreurs numériques de plus en plus importantes, et, outre des temps de calcul prohibitifs, il est quasiment certain que le processus de tir ne convergera pas vers un résultat stable et juste.

C'est pourquoi, nous proposons une méthode itérative, qui ne travaille pas sur le système complet, et qui utilise, d'une part l'algorithme de simulation décrit au Chapitre III, d'autre part la propriété de linéarité du système adjoint.

Bien qu'il paraisse difficile d'assurer une convergence certaine, on peut espérer qu'avec une valeur initiale plausible de u(t), la méthode donnera des résultats cohérents.

L'organigramme suivant donne un aperçu général de la procédure proposée :



Nous pouvons tenter d'évaluer le temps de calcul nécessaire, dans l'hypothèse d'une convergence moyennement rapide, sur IBM 370/135, avec les bases suivantes :

* Calcul des profils g et θ : 2 minutes par itération
  Nombre d'itérations à cette étape : de 10 à 20.

* Calcul de $\frac{\partial f}{\partial x}$: 1 à 2 minutes

* Résolution du système adjoint (Cf Annexe IV a)
  Sa dimension est 4N. Il faut donc résoudre 2N+1 systèmes, c'est-à-dire au total 4N(2N+1) équations.

Le décomposition en sous-systèmes linéaires découplés, à conditions en une seule extrémité pouvant être effectuée, l'intégration est possible mais demandera un temps certainement assez long.

(Si N = 2, il y a 40 équations à intégrer ;
Si N = 5, elles sont au nombre de 220)

Evaluons-le à l'intervalle (5 minutes, 1/2 heure) suivant l'ordre de troncation (N) choisi.

* Calcul de u(t) : négligeable

* Nombre total d'itérations : de 10 à 40.

Ces valeurs conduisent à un intervalle de temps de calcul compris entre 4 h 30 et 48 h. Les extrêmes ayant peu de chance d'être atteints, nous devons prévoir un temps de calcul d'au moint 6 heures, probablement de l'ordre de 10 à 15 heures.

Si nous ajoutons à cela l'établissement des programmes, certainement assez importants, leur mise au point, et les essais successifs, le coût total de l'opération risque d'être extrêmement élevé. C'est pourquoi, nous avons préféré ne pas entreprendre cette partie du travail. C'est d'autant plus regrettable que cette méthode nous semble intéressante et efficace et que, la théorie étant totalement achevée, il paraissait nécessaire d'obtenir des résultats quantitatifs.

Dans cet esprit, nous avons donc traité complètement un exemple simple et didactique, décrit dans le paragraphe suivant, qui permettra de constater la bonne tenue numérique de la méthode.

IV-III - EXEMPLE SIMPLE

La procédure d'optimisation décrite précédemment peut donc apparaître d'un emploi assez lourd et difficile dans les processus complexes. Pour cette raison, et afin de bien en faire ressortir l'intérêt, nous l'avons appliquée à un cas simple, représenté par les équations traitées au cours du deuxième chapitre.

Considérons un four cylindrique, dans lequel circule un fluide gazeux pénétrant à une température T_e. La paroi est portée à une température $T_w(x)$.

Nous posons le problème suivant :

Comment déterminer le profil de température $T_w^*(x)$ qu'il faut appliquer à la paroi, pour que la température au centre de l'appareil soit rigoureusement et mathématiquement égale à un profil donné (consigne) $T^*(o,x)$?

Le modèle bidimensionnel du processus est le suivant :

$$\alpha''\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial\theta}{\partial\rho} + \frac{\partial^2\theta}{\partial\rho^2}\right] = \frac{\partial\theta}{\partial x} \qquad (4301)$$

avec :

$$\begin{cases} \rho = 0 \quad \dfrac{\partial\theta}{\partial\rho} = 0 \quad \forall x \quad [0,1] & (4302) \\ \rho = 1 - \dfrac{\partial\theta}{\partial\rho} = Bi\ (\theta-\theta_w) \quad \forall x \quad [0,1] & (4303) \\ x = 0 \quad \theta = 0 \quad \forall\rho \quad [0,1] & (4304) \end{cases}$$

sachant que toutes les grandeurs sont sans dimension :

$$\theta = \frac{T-T_e}{T_e} \qquad \theta_w = \frac{T_w-T_e}{T_e} \qquad \rho = \frac{r}{R} \qquad x = \frac{z}{L}$$

$$Bi = \frac{H_w R}{K_e} \qquad \alpha'' = \frac{K_e V_m L}{v C_p R^2}$$

avec les valeurs numériques relatives au pilote semi-industriel de la Raffinerie ANTAR-Donges :

$$\begin{cases} \alpha'' = 1{,}156 \\ Bi = 2{,}7 \\ T_E = 100°C \end{cases}$$

$$(R = 0{,}047\ m\ ;\ \ L = 5{,}6\ m)$$

IV-III-1 - <u>Transformation du système</u> - <u>choix du critère</u>

En reprenant à nouveau la procédure de transformation intégrale, on obtient le système différentiel :

$$\frac{1}{\alpha''}\frac{d\bar\theta_n}{dx} + \lambda_n^2\,\bar\theta_n = \frac{2Bi\,\theta_w}{(1+\frac{Bi^2}{\lambda_n^2})J_o(\lambda_n)} \qquad \forall n = 1,2...N$$

avec la condition initiale $\bar\theta_n(0) = 0$ (4312)

les λ_n étant solution de $\lambda = Bi\,\dfrac{J_0(\lambda)}{J_1(\lambda)}$ (4313)

$\theta(\rho,x)$ sera donné par :

$$\theta(\rho,x) = \sum_{n=1}^{N} \bar{\theta}_n(x) J_0(\lambda_n \rho) \qquad (4314)$$

Effectuons les changements de variables :

$$\begin{cases} x_n(t) = \bar{\theta}_n(x) & \forall n, \text{ c'est-à-dire } \underline{X} = \begin{vmatrix} \bar{\theta}_1 \\ \bar{\theta}_n \end{vmatrix} \\ u = \theta_w \end{cases}$$

Posons également :

$$\begin{cases} b_n = \dfrac{2\alpha'' Bi}{(1+\dfrac{Bi^2}{\lambda_n^2}) J_0(\lambda_n)} \quad , \forall n & \underline{B} = \begin{vmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{vmatrix} \\ a_n = -\lambda_n^2 \alpha'' \quad , \forall n \end{cases}$$

Le système prend ainsi la forme habituelle :

(4315)
$$\dot{\underline{X}} = A\underline{X} + \underline{B}u$$
avec $\underline{X}(o) = \underline{0}$

A est une matrice diagonale $\begin{vmatrix} a_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_n \end{vmatrix}$

Le critère à minimiser est :

$$J = \frac{1}{2} \int_0^1 |\theta(0,t) - \theta^*(t)|^2 dt$$

où $\theta^*(t)$ est le profil consigne adimensionnel au centre du réacteur.

Plaçons nous dans l'espace des fonctions transformées :

$$\theta(o,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\theta}_n(t) J_0(\lambda_n \rho = o) = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\theta}_n(t)$$

d'où : $\theta(0,t) \simeq \sum_{n=1}^{N} x_n(t)$ (4316), si N est l'ordre de troncation retenu.

En posant : $$x_{N+1} = \sum_{n=1}^{N} x_n = \sum_{n=1}^{N} \bar{\theta}_n(t) \qquad (4317)$$

et $$x^* = \theta^*(t) \qquad (4318)$$

il vient : $$\boxed{J = \frac{1}{2} \int_0^1 (x_{N+1} - x^*)^2 dt} \qquad (4319)$$

IV-III-2 - Calcul de la commande optimale

Avant d'appliquer le principe de Pontryagin, nous devons finir de mettre le système sous une forme classique.

Posons donc $x_{N+2}(t) = \frac{1}{2}\int_0^t (x_{N+1} - x^*)^2 d\tau$

Ceci rajoute l'équation d'état :

$$\dot{x}_{N+2} = \frac{1}{2}(x_{N+1} - x^*)^2$$

avec la condition initiale $x_{N+1}(0) = 0$

Nous savons d'autre part que $x_{N+1} = \sum_{n=1}^{N} x_n$, et que $x_n(0) = 0$ $\forall n = 1,2...N$. Ceci implique : $x_{N+1}(0) = 0$.

Le système global peut donc s'écrire :

$$\left[\begin{array}{ll} \dot{x}_1 & = a_1x_1 + b_1u \\ \dot{x}_2 & = a_2x_2 + b_2u \\ \vdots & \\ \dot{x}_N & = a_Nx_N + b_Nu \\ \dot{x}_{n+1} & = \sum_{i=1}^{N}(a_ix_i) + u\sum_{i=1}^{N} b_i \\ \dot{x}_{N+2} & = \frac{1}{2}(x_{N+1} - x^*)^2 \end{array}\right. \qquad (4321)$$

avec $x_i(0) = 0$ $\forall i = 1,2...N+2$ (4322)

Le problème est donc de trouver u(t) qui minimisera $x_{N+2}(1)$.

Soit le vecteur adjoint $\underline{z}$ de dimension N+2.

L'Hamiltonien H s'écrira :

$$H = \sum_{i=1}^{N} z_i(a_ix_i + b_iu) + z_{N+1}\sum_{i=1}^{N} a_ix_i + z_{N+1}u\sum_{i=1}^{N} b_i + z_{n+2} \times \frac{1}{2}(x_{N+1} - x^*)^2$$

Le système adjoint est donné par la relation habituelle :

$\dot{\underline{z}} = \frac{-\partial H}{\partial \underline{x}}$ c'est-à-dire :

$$\begin{cases} \dot{z}_i = -a_iz_i - a_iz_{N+1} \quad \forall i = 1,2...N \\ \dot{z}_{N+1} = -z_{N+2}(x_{N+1} - x^*) \\ \dot{z}_{N+2} = 0 \end{cases}$$

avec $\underline{z}(1) = \begin{vmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}$ (il faut minimiser $x_{N+2}(1)$)

Ceci implique $z_{N+2} = 1$, $\forall t \in [0,1]$, et le nouveau système adjoint s'écrit alors :

$$(4323) \qquad \begin{cases} \dot{z}_i = -a_i(z_i + z_{N+1}) & \forall i = 1,2...N \\ \dot{z}_{n+1} = -(x_{N+1} - x^*) \end{cases}$$

avec $\underline{z}(1) = \underline{0}$ (4324)

Le principe du maximum va maintenant nous permettre de complèter la formulation du problème : à l'optimum ($u=u^*$), nous avons :

$$\left.\frac{\partial H}{\partial u}\right|_{u = u^*} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} b_i z_i + z_{n+1} \sum_{i=1}^{N} b_i = 0$$

d'où $z_{N+1} = \dfrac{-\sum_{i=1}^{N} b_i z_i}{\sum_{i=1}^{N} b_i}$, qui conduit à :

$$\dot{z}_{N+1} = -\left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{N} b_i}\right) \sum_{i=1}^{N} b_i \dot{z}_i \quad \text{avec } z_{N+1}(1) = 0$$

On peut donc écrire à nouveau le système $\begin{matrix}(4323)\\(4324)\end{matrix}$

$$\begin{cases} \dot{z}_i = -a_i(z_i + z_{N+1}) & \forall i = 1,2...N \\ \dot{z}_{N+1} = + \dfrac{1}{\sum_{i=1}^{N} b_i} \sum_{i=1}^{N} b_i a_i (z_i + z_{N+1}) \end{cases}$$

avec $z_i(1) = 0 \quad \forall i = 1,2...N+1$

Ce système est libre, linéaire, avec conditions finales nulles, sa solution est donc :

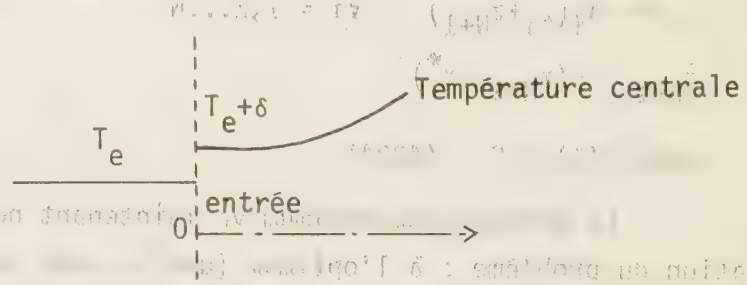
$$z_i(t) = 0 \quad \forall t \in [0,1], \ \forall i = 1,2...N+1$$

Ceci donne en particulier $z_{N+1} = 0$; donc $\dot{z}_{N+1} = 0$

D'après (4323) on a donc :

$$\dot{z}_{N+1} = -(x_{N+1} - x^*) = 0 \qquad \boxed{x_{N+1} = x^*_{\forall t}} \qquad (4325)$$

C'est-à-dire : J = 0. Le minimum est donc exactement atteint. Cependant, la relation (4325) impose une condition restrictive sur la consigne, qui est $x^*(0) = 0$. Ceci signifie simplement qu'il ne doit pas y avoir de discontinuité à l'entrée du réacteur sur le profil central. Le problème mathématique étant continu, il semble en effet impossible d'obtenir une commande finie pouvant réaliser ce cas :



Il reste maintenant à déterminer la commande optimale u^*.

La consigne étant respectée à l'optimum (4325), le système d'état (4321) devient, une fois supprimée la dernière équation devenue inutile :

$$\dot{x}_i = a_i x_i + b_i u^* \qquad \forall i = 1,2...N$$

$$\dot{x}^* = \sum_{i=1}^{N} a_i x_i + u^* \sum_{i=1}^{N} b_i$$

ce qui donne : $$\boxed{u^* = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} b_i} \left(\dot{x}^* - \sum_{i=1}^{N} a_i x_i\right)} \qquad (4326)$$

Il faut donc intégrer le système différentiel :

$$(4327) \quad \begin{cases} \dot{x}_i = a_i x_i + \dfrac{b_i}{\sum_{j=1}^{N} b_j} \left(\dot{x}^*(t) - \sum_{j=1}^{N} a_j x_j\right) & \forall i = 1,2...N \\ \text{avec } x_i(0) = 0 & \forall i = 1,2...N \end{cases}$$

Le problème est donc résolu, et nous pouvons maintenant définir le traitement numérique à effectuer :

- Résolution du système différentiel (4327) linéaire en x_i, avec excitation connue $\dot{x}^*(t)$, par une méthode du type Runge et Kutta-Merson, ou par toute autre méthode adaptée à ce cas (exponentielle de matrice avec convolution par exemple).
- Calcul de la commande optimale $u^*(t)$, à l'aide de la relation (4326).

- Calcul du profil bidimensionnel de température à partir des x_i.

IV-III-3 - Résultats - Remarques

Les valeurs numériques données et calculées étaient :

$\alpha'' = 1{,}156$ $\quad$ Bi = 2,7 $\quad$ Te = 100°C

N = 5 ; $\underline{\lambda} = [1.74, 4.414, 7.374, 10.43, 13.52]$

$\underline{a} = [-3.5, -22.6 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots -212]$

$|bi|$ est de l'ordre de 20.

Nous avons testé plusieurs types de profils consignes (rampe, parabole, cubique). Nous ne présentons ici que les résultats relatifs au cas d'une consigne parabolique, les autres cas ne donnant pas lieu à des remarques particulières.

Au vu des courbes présentées Fig. 433, on peut a priori être surpris par l'allure de la fonction de commande ; cependant, il faut rappeler que le problème posé est un problème théorique destiné à appliquer la méthode d'optimisation de façon relativement simple. C'est pourquoi, si l'on désire suivre point par point, c'est-à-dire mathématiquement, un profil central donné, la commande à la paroi, compte tenu des lois de transferts de chaleur et de l'inertie thermique, ne pourra qu'être sujette à des variations relativement violentes (freinage-accélération). Le problème ayant été résolu en l'absence de contraintes, la solution donnée est une solution mathématique, et, de ce point de vue, est parfaitement logique et plausible. Enfin, et pour en terminer avec cet exemple, signalons que le temps de calcul total était de l'ordre de deux minutes sur IBM 1130.

IV - CONCLUSION DE LA QUATRIEME PARTIE -

Au cours de ce chapitre, nous avons étudié de façon assez approfondie les problèmes posés par la commande en température des processus chimiques auxquels nous nous sommes intéressés.

Après avoir effectué une présentation non détaillée de la méthode générale, nous avons traité complètement la théorie de la commande, dans le cas d'un réacteur à stoechimétrie unique, et effectué une application numérique simple dont les résultats étaient très satisfaisants dans le cas d'un échangeur de chaleur.

Ainsi, le seul problème n'ayant pas été traité numériquement, demeure la mise en oeuvre de la deuxième étape. Ecartée provisoirement pour des raisons de temps et de coût de calcul, cette application peut néanmoins faire l'objet de travaux ultérieurs ; compte tenu de l'état d'avancement de l'algorithme, et de notre expérience dans ce type de méthodes, nous pensons que les résultats devraient présenter un certain intérêt.

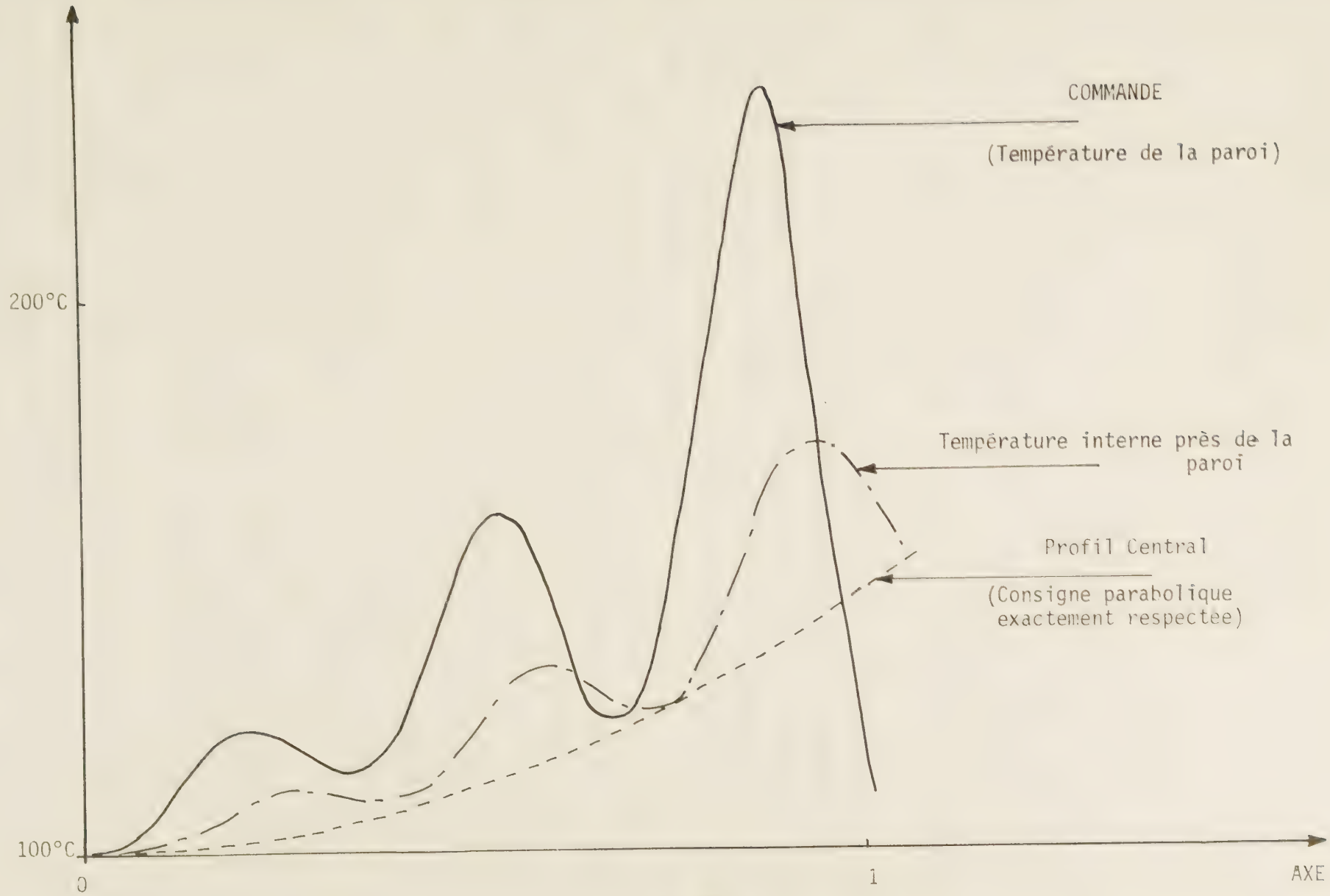

COMMANDE
(Température de la paroi)
Température interne près de la paroi
Profil Central
(Consigne parabolique exactement respectée)
200°C
100°C
0
1
AXE

Fig. 433

CONCLUSION

Nous souhaitons, à la fin de ce travail, en reconsidérer les divers aspects, afin d'en dégager les principaux résultats originaux, et les perspectives de développement. Nous avons eu le souci d'une présentation complète et structurée ; ceci explique les nombreuses annexes, portant aussi bien sur les rappels physico-chimiques que mathématiques. Cette présentation formelle ne permet pas en effet de distinguer les calculs classiques de nos apports originaux.

Dans le chapitre premier (modélisation), les difficultés essentielles portent sur la recherche des mécanismes réactionnels et sur l'obtention des cinétiques de réactions. Pour des raisons matérielles et d'environnement scientifique, nous n'avons pas appréhendé ces sujets. Nous nous sommes efforcés d'utiliser un formalisme cohérent, permettant une approche rigoureuse et claire des modèles de connaissance utilisés.

Dans la seconde partie, traitant de la simulation de l'échangeur thermique, nous avons mis à profit la simplicité du modèle mathématique pour tester plusieurs algorithmes de difficulté croissante (différences finies - approximation cubique ...). La procédure de collocation orthogonale utilisant les polynômes de CHEBYSHEV nous semble une démarche originale, susceptible d'applications diverses dans des problèmes de structure mathématique analogue.

La simulation des processus chimiques régis par des équations aux dérivées partielles elliptiques non linéairement couplées fait l'objet du chapitre III. L'algorithme de simulation utilise la décomposition de la solution sur une base propre de fonctions de BESSEL, résultat désormais classique pour les problèmes cylindriqués. Les contributions originales que nous mentionnons sont le calcul récurrent des intégrales I°_{j+1}, la prise en considération de la réaction inverse, l'amélioration de la convergence itérative lors de la recherche des nappes - solutions.

La théorie de l'optimisation des systèmes régis par des équations aux dérivées partielles fait actuellement l'objet de travaux d'un haut niveau mathématique. Cependant, l'application des résultats obtenus aux systèmes concrets présente souvent des difficultés, et ne permet guère de conserver au problème son sens physique.

A notre connaissance, il semble que la méthode d'optimisation que nous avons proposée soit de conception originale et d'intérêt général. Elle conjugue, en effet, la procédure utilisée dans la 3ème partie, les propriétés mathématiques des noyaux des opérateurs intégraux, et le principe du maximum de Pontryagin. Cette approche, que nous avons testée avec succès sur l'exemple de l'échangeur thermique, nous semble mériter, en raison de son caractère général, des études futures, tant théoriques qu'appliquées.

Il y a lieu de souligner encore que la méthode d'optimisation prend en considération le modèle global (bilans enthalpique et massique) à la différence de nombreux travaux publiés sur les modèles monodimensionnels.

Cependant, nous avons constaté l'existence dans les algorithmes présentés de certains points délicats. Les paramètres physico chimiques du modèle sont par exemple souvent difficiles à déterminer, ou bien encore, les lois cinétiques peuvent être mal connues, ou impossibles à approximer sous forme simple. Si le processus chimique est à stoechiométrie multiple, la mise en oeuvre des algorithmes nécessite des moyens de calcul très importants.

Pour l'optimisation des processus réels, il y a lieu d'adjoindre au modèle, déjà complexe, des contraintes sur l'état (par exemple pour éviter les "points chauds" au sein du lit catalytique). A l'encontre des problèmes avec contrainte sur la commande, aisément résolubles, l'état contraint est source de réelles difficultés. Par ailleurs, l'optimisation a été traitée sur des processus déterministes invariants, non perturbés. La mise en place d'un système de commande en boucle fermée permettrait de tenir compte des modifications instantanées des paramètres physiques du processus, tout au moins des grandeurs mesurables (débits - température d'entrée - composition de la charge ...) par opposition aux paramètres non mesurables, susceptibles de rendre le système non stationnaire (activité catalytique - coefficients de Fick et de Fourier ...). Une telle approche pourrait être étudiée, moyennant une simplification des modèles, en omettant par exemple, ainsi que le suggèrent certains auteurs, de tenir compte de la conduction et de la diffusion axiales.

Enfin, ce travail de thèse est susceptible d'un certain nombre de développements, parmi lesquels nous citerons :

- l'étude des régimes transitoires par double transformation
- l'étude de la stabilité des régimes dynamiques
- la simulation des réactions complexes (reforming catalytique)
- la formulation générale de notre méthode d'optimisation.

ANNEXE I.A

CHOIX DES CONDITIONS AUX LIMITES

Le problème des conditions aux limites a été largement étudié dans la littérature |15|, |28|, aussi, ne ferons-nous qu'en rappeler les résultats, accompagnés de brèves et simples explications.

Beaucoup de ces conditions ont été introduites primitivement de façon intuitive, et ont fait l'objet de justifications ultérieures. C'est pourquoi nous nous sommes efforcés de les présenter de façon "physique", même si cela nous conduit parfois à un certain manque de rigueur dans les démonstrations.

* Nous utiliserons tout d'abord l'hypothèse de symétrie cylindrique ; ceci se traduit par les relations :

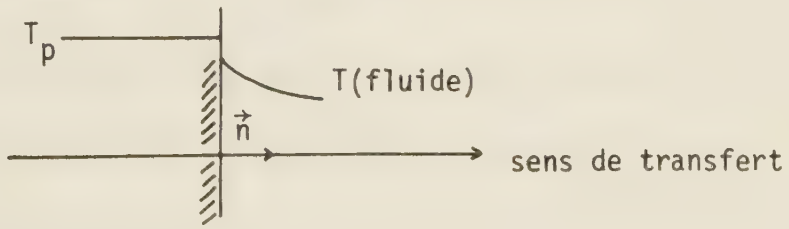
$$f(-r) = f(r)$$
$$f'(-r) = - f'(r)$$

Comme il n'y a aucune raison d'avoir un point anguleux en $r = 0$, il est nécessaire d'avoir la relation $f'(0^-) = f'(0^+)$; sachant que $f'(0^-) = - f'(0^+)$, nous obtenons : $f'(0) = 0$

d'où les conditions : $\begin{cases} \dfrac{\partial C_j}{\partial r} = 0 & \text{pour } r = 0 \\ \dfrac{\partial T}{\partial r} = 0 & \text{pour } r = 0 \end{cases}$

* Appliquons ensuite les relations de conservation du flux thermique à la paroi, à l'entrée, puis à la sortie du réacteur.

1°) Cas de la paroi :



La relation de Newton, pour une surface A, s'écrit :

$\Phi_1 = h_p\, A(T_p - T)$, dans le sens solide-fluide

Le flux entrant dans le fluide vaut :

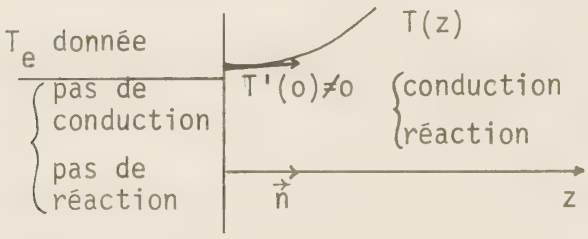
$\Phi_2 = \iint_S \vec{J}\,\vec{n}\,dS$ (ce flux est positif, compte tenu du sens du transfert), avec $\vec{J} = -K_r\,\overrightarrow{\text{grad}}\,T = -K_r \frac{\partial T}{\partial r}$. Nous avons $\Phi_1 = \Phi_2$: donc $h_p\,A(T_p - T) = -K_r \frac{\partial T}{\partial r} A$.

Cependant, pour notre part, le sens de variation de r sera opposé (r est maximum sur la paroi).

D'où : $-K_r \frac{\partial T}{\partial r} = h_p(T - T_p)$ pour $r = R_R$

2°) Cas de l'entrée

Nous supposons le transfert suivant :



La conservation du flux thermique donne :

$$\Phi_1 = \Phi_2$$

$$\begin{cases} \Phi_1 = Av\,\rho\,\hat{C}_p\,(T_e - T) & \text{(transport de chaleur dû au déplacement du fluide, à travers la surface d'entrée A)} \\ \Phi_2 = -K_z \frac{\partial T}{\partial z} A, & \text{comme précédemment} \end{cases}$$

Cependant, cette fois l'orientation de $\vec{z}$ est correcte : d'où la relation :

$$-K_z \frac{\partial T}{\partial z} = v\,\rho\,\hat{C}_p\,(T_e - T) \quad \text{pour } z = 0$$

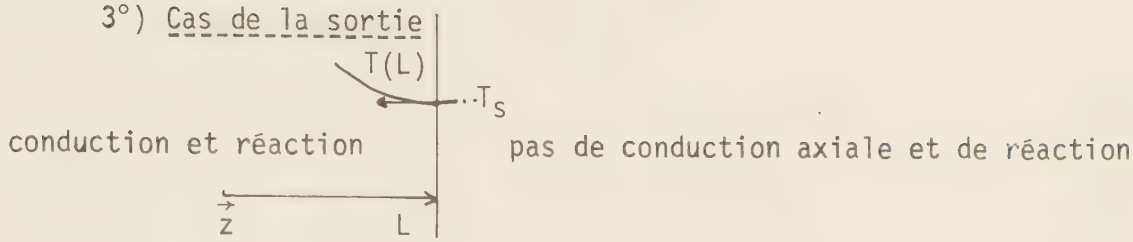
La discontinuité à l'entrée peut s'expliquer par le fait suivant :

- avant (0^-) le réacteur le fluide est à la température T_e, fixée par un préchauffeur ;

- au sein du réacteur, la température initiale (0^+) est tributaire de la réaction, peut être affectée par la conduction axiale, et n'a donc aucune raison d'être égale à T_e.

Ceci a également pour conséquence une valeur non nulle de la dérivée à l'origine, d'après la relation obtenue plus haut.

3°) Cas de la sortie



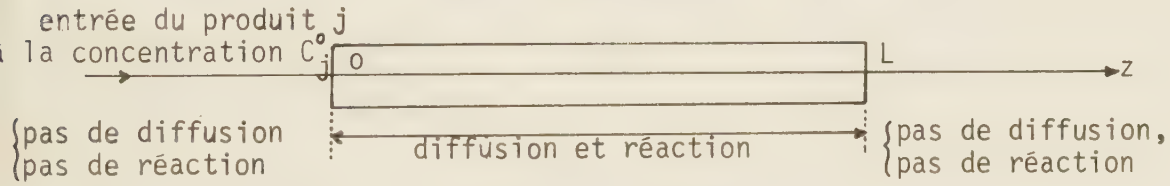
L'absence de réaction et de conduction axiale pour $z > L$ implique qu'il n'y a aucune raison pour qu'il existe une discontinuité entre la température à la fin du lit analytique, T(L), et la température de sortie T_S ; en effet, cette dernière ne variera que par conduction radiale, donc continûment : d'où $T_S = T(L)$.

Nous avons toujours, d'autre part :

$$\begin{cases} \Phi_1 = A\, v\, \rho\, \hat{C}_p\, (T-T_S) = 0 \quad \text{puisque } T(L) = T_S \\ \text{et} \quad \Phi_2 = -K_z \dfrac{\partial T}{\partial z} \end{cases}$$

d'où : $\Phi_2 = 0 \Rightarrow \dfrac{\partial T}{\partial z} = 0$ pour $z = L$

* Les relations de diffusion sont analogues aux relations de conduction. Nous supposerons également la structure suivante :



Nous aurons donc, en écrivant la conservation du flux de matière, les relations suivantes (28) :

- à l'entrée :

$$\underbrace{-D_z \frac{\partial C_j}{\partial z}}_{\text{diffusion}} = \underbrace{v\,(\overset{\circ}{C}_j - C_j)}_{\text{transport}} \quad \text{pour } z = 0$$

- à la sortie :

$$\frac{\partial C_j}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } z = L$$

- à la paroi :

$$\frac{\partial C_j}{\partial r} = 0 \quad \text{pour } r = R_R$$

En effet, à la paroi, il n'y a aucun transfert de matière par transport ; donc l'expression $\Sigma\, \Phi_i = 0$ se réduit à Φ_2 (transfert par diffusion)=0; d'où la relation ci-dessus.

ANNEXE I.B

NOTATION DES MECANISMES REACTIONNELS

Definissons les grandeurs suivantes :

$E_s \triangleq \{A_1, A_2, \ldots A_s\}$ l'ensemble des espèces chimiques *"réactantes"*

$E_p \triangleq \{A'_1, A'_2, \ldots A'_p\}$ l'ensemble des espèces chimiques *"produites"*

$F \triangleq \{B_1, B_2, \ldots B_m\}$ l'ensemble des espèces atomiques contenues dans la charge

Notons d'autre part :

$$E = E_s \cup E_p = \{A_1, A_2, \ldots A_s, A'_1, A'_2 \ldots A'_p\} = \{A_1, A_2 \ldots A_j \ldots A_n\}$$

Nous avons, par définition des formules chimiques :

$$A_j = \sum_{k=1}^{m} \beta_{kj} B_k$$

Nous appellerons réaction chimique, toute relation de la forme :

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j A_j = 0$$

et satisfaisant aux contraintes suivantes :

$\alpha_j < 0$ si $A_j \in E_s$

$\alpha_j > 0$ si $A_j \in E_p$

avec la relation : $\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \beta_{kj} = 0 \quad \forall k = 1, \ldots m$

(conservation du nombre d'atomes)

Le modèle stoechiométrique sera l'ensemble des réactions chimiques nécessaires pour rendre compte de l'observation expérimentale, à savoir :

pour certains $V_p = \sum_{j=1}^{p} \alpha_j A_j \in E_p$,

$$\exists\ V_s \in E_s : V_s \rightarrow V_p$$

Le modèle stoechiométrique s'écrit sous la forme :

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji} A_j = 0 \qquad i = 1, R'$$

Toutefois, les R' réactions possibles ne sont pas forcément indispensables pour rendre compte de l'expérience ; aussi nous introduirons le modèle stoechiométrique libre :

$$\exists\, R \leq R' : \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji} A_j = 0 \qquad i = 1,R$$

tel que : $$\sum_{i=1}^{R} \lambda_i \alpha_{ji} = 0 \quad \text{pour } j = 1,n \quad \Rightarrow \quad \lambda_i = 0 \quad \forall i$$

Nous aurons ainsi un modèle stoechimétrique minimal, ne comportant que des réactions indépendantes.

Afin de caractériser un système chimique en évolution, il nous reste à introduire la notion d'extension : ξ

Considérons la réaction :

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji} A_j = 0$$

et, dans cette réaction, les espèces chimiques A_k et A_ℓ, représentés par leurs nombres de moles.

	A_k	A_ℓ
t=0	N_{ko}	$N_{\ell o}$
t	N_k	N_ℓ

$$\frac{N_{\ell o}-N_\ell}{\alpha_{i\ell}} = \frac{N_{ko}-N_k}{\alpha_{ik}} = -\,\xi_i' \qquad \forall \ell\ ,\ k$$

Soit $N_\ell = N_{\ell o} + \alpha_{i\ell}\xi_i'$

et pour l'ensemble du modèle stoéchimétrique libre

$$N_\ell = N_{\ell o} + \sum_{i=1}^{R} \alpha_{i\ell}\xi_i'$$

ξ_i' est l'extension molaire de la réaction i.

ENTHALPIE

Une réaction consomme ou produit une certaine quantité de chaleur. On appelle ΔH_i cette quantité, appelée enthalpie de la réaction i, à pression constante.

On a : $\Delta H_i = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji} h_j$, où h_j est l'enthalpie molaire partielle de j

L'enthalpie varie avac la température :

$$\Delta H_i(T) = \Delta H_i(T_o) + \int_{T_o}^{T} \Delta C_p dT$$

avec $\Delta C_p = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji} C_{pj}$

(C_{pj} : chaleur molaire)

ANNEXE I.C

REMARQUES SUR LA LOI DE VITESSE

I.C.1 - GENERALITES

Soit la réaction $\sum_{j=1}^{n} \alpha_j A_j = 0$

Nous avons (annexe I.B) : $N_\ell = N_{\ell o} + \alpha_{i\ell} \xi'_i$

Divisons par V (volume) :

$$\Rightarrow \quad C_j = C_{j_o} + \alpha_{i\ell} \xi_i \quad (\text{avec } \xi_i = \frac{\xi'_i}{V})$$

La vitesse de réaction est tributaire des 2 réactions, directe et inverse :

$$\frac{d\xi}{dt} = r_d - r_i$$

Soit l'expression de la vitesse de réaction directe :

$$r_d = U\, C_1^{\beta_1}\, C_2^{\beta_2} \ldots\ldots C_n^{\beta_n} = U \prod_{i=1}^{n} C_i^{\beta_i}, \quad \text{avec :}$$

pour les réactants : $\alpha_i < 0 \Rightarrow \beta_i > 0$ soit $\alpha_i \beta_i \leq 0$

pour les produits : $\alpha_i > 0 \Rightarrow \beta_i < 0$ soit $\alpha_i \beta_i \leq 0$,

donc, d'une manière générale, pour r_d, en faisant exception des réactions auto-catalytiques :

$$\alpha_i \beta_i \leq 0 \quad \text{pour } r_d$$

Soit, de même : $r_i = U'\, C_1^{\gamma_1}\, C_2^{\gamma_2} \ldots\ldots C_n^{\gamma_n} = U' \prod_{i=1}^{n} C_i^{\gamma_i}$ (U et U' sont fonction de la température T)

avec $\alpha_i \beta_i \geq 0$ pour r_i

Donc, pour la réaction totale, nous aurons la vitesse r :

$$r = U \prod_{i=1}^{n} C_i^{\beta_i} - U' \prod_{i=1}^{n} C_i^{\gamma_i} = U(T) \prod_{i=1}^{n} (C_{io} + \alpha_i \xi)^{\beta_i} - U'(T) \prod_{i=1}^{n} (C_{io} + \alpha_i \xi)^{\gamma_i} \quad (1C1)$$

Remarques : * β_i, γ_i sont, par définition, les ordres partiels des réactions "directe" et "inverse" par rapport à l'espèce chimique i.

* $\bar{\beta} = \sum_{i=1}^{n} \beta_i$ et $\bar{\gamma} = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i$ sont les ordres totaux des réactions "directe" et "inverse".

* Le plus grand de $\bar{\beta}$ et $\bar{\gamma}$ est l'ordre de la réaction totale.

* Si U' = 0, la réaction est irréversible.

* Si $r_d >>> r_i$ la réaction est loin des conditions d'équilibre.

Lorsque le régime permanent est atteint, $r(\xi,T) = 0$ d'où :

$$\frac{U}{U'} = \prod_{j=1}^{n} C_j^{(\gamma_j - \beta_j)}$$

Or, la thermodynamique permet d'établir que :

$$K = \prod_{j=1}^{n} C_j^{\alpha_j}$$

K(T) et U/U' ne sont fonction que de T, alors que les seconds membres sont fonction de ξ ; par suite :

$$\alpha_j = \gamma_j - \beta_j$$

$$K = \frac{U}{U'}$$

En prenant la différentielle logarithmique par rapport à la température, nous avons :

$$\frac{d}{dT} \text{Log } K = \frac{d}{dT} \text{Log } U - \frac{d}{dT} \text{Log } U' = \frac{\Delta H}{RT^2}$$

Ce résultat de la thermodynamique suggère d'écrire :

$$U = A \exp \frac{-E}{RT} \quad \text{et} \quad U' = A' \exp \frac{-E'}{RT}$$

$$K = \frac{U}{U'} = \frac{A}{A'} \exp \frac{-(E-E')}{RT} = K^* \exp \frac{-\Delta H}{RT}$$

d'où : $K^* = \frac{A}{A'}$ et $\Delta H = E-E'$

E est l'énergie d'activation et A le facteur de fréquence.

Ce résultat constitue la loi d'Arrhénius.

Nous avons : $\frac{dU}{dT} = \frac{E}{RT^2} U$

et $\frac{d^2U}{dT^2} = (\frac{E}{RT^2})^2 (1 - \frac{2RT}{E}) U$

$\dot{U} > 0$: donc U croit toujours avec la température ; $\ddot{U} = 0 \iff T = \frac{E}{2R} \# \frac{E}{4}$.
Généralement E est de l'ordre de 10^4 cal/mole ; donc $T = \frac{10^4}{4} = 2500°K$; autrement dit, le point d'inflexion apparait à une température élevée.

Pour les températures usuelles, par exemple 100°C ≃ 400°K

$$\frac{\Delta K}{K} = \frac{10^4}{2\times 16.10^4} \Delta T = \frac{\Delta T}{32} \Rightarrow \Delta K \# \frac{K}{3} \text{ pour } \Delta T = 10°C$$

ce qui montre que l'ancienne règle des chimistes, annonçant que la constante de vitesse doublait pour une élévation de température de 10°C, est absolument fausse. Il ne faut retenir de cette loi que son idée qualitative annonçant une évolution rapide de U mais pas son idée quantitative.

I.C.2 - INFLUENCE DES GRANDEURS PHYSIQUE ET CHIMIQUE SUR LA DYNAMIQUE

La relation (IC1) s'écrit maintenant :

$$r(\xi,T) = A \exp(-E/RT) \prod_{j=1}^{n} (C_{jo}+\alpha_j\xi)^{\beta_j} - A' \exp(-E'/RT) \prod_{j=1}^{n} (C_{jo}+\alpha_j\xi)^{\gamma_j} \quad \text{(IC2)}$$

I.C.2.1 - Influence du facteur chimique : extension ξ

$$\frac{d}{d\xi} \prod_{j=1}^{n} C_j^{\beta_j} = \frac{d}{d\xi} \prod_{j=1}^{n} (C_{jo}+\alpha_j\xi)^{\beta_j} = \prod_{j=1}^{n} C_j^{\beta_j} \sum_{k=1}^{n} \frac{\alpha_k\beta_k}{C_k}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\xi} \prod_{j=1}^{n} C_j^{\gamma_j} = \prod_{j=1}^{n} C_j^{\gamma_j} \sum_{k=1}^{n} \frac{\alpha_k\gamma_k}{C_k}$$

Soit pour (IC2) :

$$\frac{\partial r}{\partial \xi} = U \prod_{j=1}^{n} C_j^{\beta_j} \sum_{k=1}^{n} \frac{\alpha_k\beta_k}{C_k} - U' \prod_{j=1}^{n} C_j^{\gamma_j} \sum_{k=1}^{n} \frac{\alpha_k\gamma_k}{C_k}$$

$U \prod C_j^{\beta_j}$ et $U' \prod C_j^{\gamma_j}$ sont ≥ 0 ; de plus, $\alpha_k\beta_k \leq 0$ et $\alpha_k\gamma_k \geq 0$

d'où : $\frac{\partial r}{\partial \xi} \leq 0$

Ainsi, nous montrons que la vitesse d'évolution d'un système chimique est fonction décroissante de l'extension de la réaction.

I.C.2.2 - Influence des conditions initiales

Nous traitons le cas d'une espèce chimique j quelconque.

$$\frac{\partial r}{\partial C_{jo}} = U \Pi C_j^{\beta_j} \cdot \frac{\beta_j}{C_j} - U' \Pi C_j^{\gamma_j} \cdot \frac{\gamma_j}{C_j}$$

Multiplions cette équation par α_j.

$$\Rightarrow \quad \alpha_j \frac{\partial r}{\partial C_{jo}} = U \Pi C_j^{\beta_j} \cdot \frac{\alpha_j \beta_j}{C_j} - U' \Pi C_j^{\gamma_j} \frac{\alpha_j \gamma_j}{C_j} < 0$$

$$\begin{cases} \text{pour } A_j \quad E_r \quad \alpha_j < 0 \quad \Rightarrow \quad \dfrac{\partial r}{\partial C_{jo}} > 0 \\ \text{pour } A_j \quad E_p \quad \alpha_j > 0 \quad \Rightarrow \quad \dfrac{\partial r}{\partial C_{jo}} < 0 \end{cases}$$

D'où la conclusion :

L'augmentation de la concentration initiale d'un réactant accélère l'évolution du système chimique, alors que l'augmentation de la concentration initiale d'un produit la freine.

I.C.2.3 - Influence du facteur physique : température

$$r(\xi,T) = A \exp(-E/RT) \Pi C_j^{\beta_j} - A' \exp(-E'/RT) \Pi C_j^{\gamma_j}$$

$$\frac{\partial r}{\partial T} = \frac{E}{RT^2}(U \Pi) - \frac{E'}{RT^2}(U'\Pi') = \frac{1}{RT^2}(E\, r_d - E'\, r_i)$$

Ici, divers cas peuvent se présenter :

* si la réaction est irréversible $r_i = 0 \Rightarrow \frac{\partial r}{\partial T} > 0$: la température accélère les réactions irréversibles ;

* si la réaction est réversible endothermique $\Delta H = E-E' > 0 \Rightarrow \frac{\partial r}{\partial T} > 0$: la température favorise les réactions endothermiques

* si la réaction est exothermique $\Delta H = E-E' < 0$, le cas est plus délicat à résoudre - étudions l'annulation de $\frac{\partial r}{\partial T}$, qui se produit pour T=T

$$E\, A \exp(-E/RT*) \Pi C_j^{\beta_j} = E'A' \exp(-E'/RT*) \Pi C_j^{\gamma_j}$$

$$\frac{EA}{E'A'} \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT*}\right) \Pi C_j^{-\alpha_j} = 1$$

$$\frac{\Delta H}{RT*} = \left[\text{Log}\, \frac{E}{E'} + \text{Log}\, K^* - \Sigma\, \alpha_j\, \text{Log}\, C_j\right]$$

$$T* = \left[- \frac{\Delta H}{R}\right] \left[\text{Log } \frac{E'}{E} - \text{Log } K^* + \Sigma\ \alpha_j \text{ Log } C_j\right]^{-1}$$

$$T*(\xi) < \left[- \frac{\Delta H}{R}\right] \left[- \text{Log } K^* + \Sigma\ \alpha_j \text{ Log } C_j\right]^{-1} = T_e(\xi)$$

$T*(\xi)$ et $T_e(\xi)$ sont fonctions décroissantes de ξ.

Posons $p = \frac{E}{-\Delta H}$ avec $p > 0$ pour une réaction exothermique ; alors $\frac{E'}{-\Delta H} = p+1$.

$$\exp\ (-E/RT) = |\exp\ (-\Delta H/RT)|^{-p}$$

$$\exp\ (-E'/RT) = |\exp\ (-\Delta H/RT)|^{-(p+1)}$$

pour $T = T*$, on a : $\exp\ (-\Delta H/RT*) = \frac{A'E'}{AE}\ \Pi\ C_j^{\alpha_j}$

$$r*(\xi,T) = r(\xi,T*) = A \exp\ (-E/RT*) \Pi\ C_j^{\beta_j} \left|1 - \frac{A'}{A} \exp\ (-(E'-E)/(RT*)) \Pi\ C_j^{\gamma_j - \beta_j}\right|$$

$$r*(\xi,T) = A \exp\ (-E/RT*) \Pi\ C_j^{\beta_j} \left|1 - \Pi\ C_j^{\alpha_j} / K\right|$$

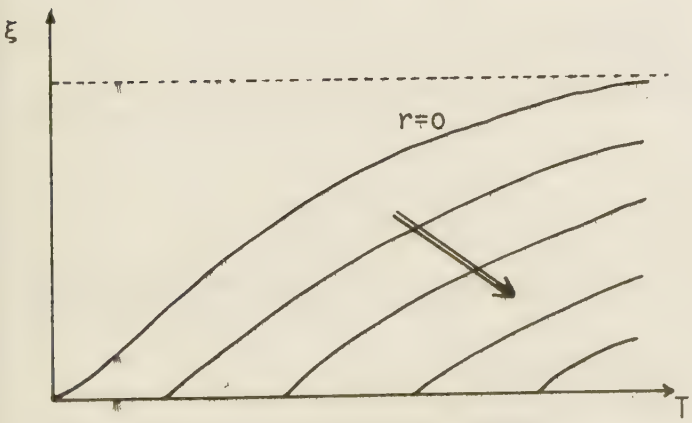
$$r*(\xi,T) = A \left(\frac{A'E'}{AE}\ \Pi\ C_j^{\alpha_j}\right)^{-p}\ \Pi\ C_j^{\beta_j} \left|1 - \frac{E}{E'}\right|$$

$$r*(\xi,T) = \frac{A^{p+1}}{A'^{p}} \cdot \frac{p^p}{(p+1)^{p+1}} \cdot \prod_{j=1}^{n} C_j^{\beta_j - p\alpha_j}$$

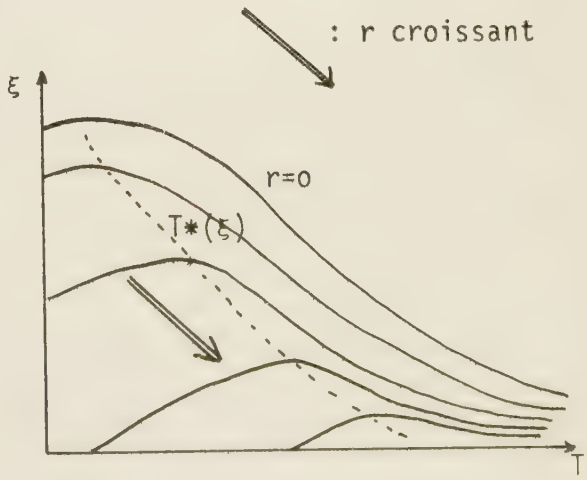
Soit en différentiant par rapport à ξ

$$\frac{dr*(\xi,T)}{d\xi} = r*(\xi,T) \sum_{j=1}^{n} \frac{\alpha_j \beta_j - p\alpha_j^2}{C_j} < 0$$

Ainsi, nous pouvons représenter les courbes de niveau de la fonction $r(\xi,T)$ dans le plan (ξ,T).



"réaction endothermique ou irréversible"

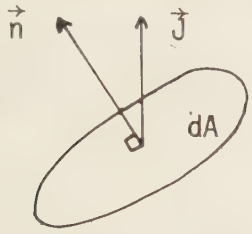


"réaction exothermique"

ANNEXE I.D

RAPPELS DE CONDUCTION ET DE DIFFUSION

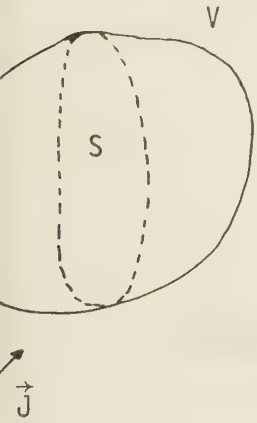
I-D-1 - CONDUCTION - LOI DE FOURIER



$\vec{J}$ vecteur densité de chaleur
$\vec{n}$ " normal à la surface
dA surface élémentaire
$d\Phi$ flux de chaleur : quantité de chaleur traversant la surface par unité de temps
$d\Phi = \vec{J}\,\vec{n}\,dA$

expression de J — $\vec{J} = -\lambda\,\overrightarrow{\text{grad}}\ \theta$ ou θ est la température fonction des variables d'espaces - λ coefficient de conductibilité thermique de la substance supposée isotrope.

bilan d'énergie



* quantité de chaleur entrant dans le volume V, d'aire S :

$$\Phi = -\iint_S \vec{J}\vec{n}dS$$

Φ a la signification de la quantité de chaleur qui rentre dans V au sens algébrique (ce qui rentre - ce qui sort)

* quantité de chaleur qui s'accumule :

$$V\rho C\,\frac{\partial\theta}{\partial t} = \rho C\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)\iiint_V dV$$

* quantité de chaleur qui se crée sous l'action d'une source interne (effet Joule ou réaction chimique).

$$\iiint_V q dV$$

équation de bilan : [ce qui rentre] + [ce qui se crée] = [ce qui s'accumule]

$$\underbrace{-\iint_S JndS}_{\Phi} + \iiint_V qdV = \iiint_V \rho C\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)dV \qquad 1(1)$$

Φ peut s'écrire :

$$\Phi = -\iint_S \vec{J}\vec{n}dS = +\lambda \iint_S \vec{n}\ \text{grad}\ \vec{\theta}\ dS = +\lambda \iiint_V \text{div grad}\ \theta dV = +\lambda \iiint_V \Delta\theta dV$$

(d'après la formule d'Ostrogradski)

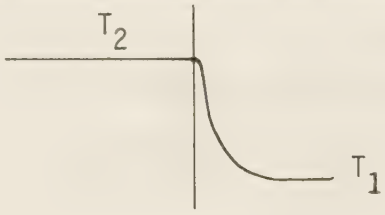
L'équation 1(1) devient :

$$\iiint_V \left[\lambda\Delta\theta + q - \rho\ C\ \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)\right] dV = 0$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \alpha\Delta\theta + \dfrac{q}{\rho C} = \dfrac{\partial\theta}{\partial t} \\ \alpha = \dfrac{\lambda}{\rho C} \end{array}} \qquad 1(2)$$

1(2) = équation générale de propagation de la chaleur.

I-D-2 - TRANSFERT DE CHALEUR SOLIDE-FLUIDE - RELATION DE NEWTON



$\Phi = h\ A\ (T_2 - T_1)$

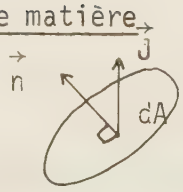
h = quantité de chaleur qui passe par unité de temps, de surface, et par degré.

I-D-3 - TRANSFERT DE MATIERE PAR DIFFUSION

relation de Fick $\qquad \vec{J} = -\ D\ \vec{\text{grad}}\ C$

- D coefficient de diffusion
- C concentration massique d'une espèce donnée (fonction des variables d'espace)
- J vecteur densité de courant de matière par diffusion.

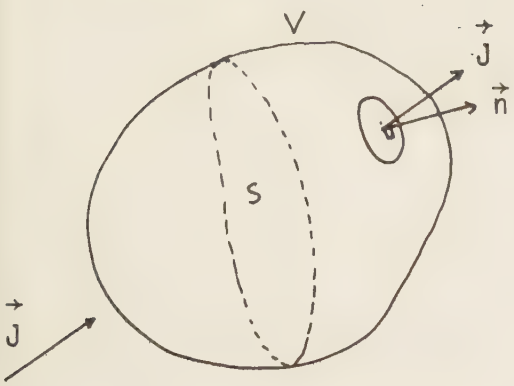
flux de matière



$d\Phi = \vec{J}\ \vec{n}\ dA$

$d\Phi$ = quantité de matière par unité de temps traversant dA par diffusion.

bilan de matière :



* quantité de matière rentrant dans le volume V d'aire S par diffusion :

$$\Phi = - \iint_S \vec{J}\,\vec{n}\,dS = \iint_S D \text{ grad } C\,\vec{n}\,dS$$

* quantité de matière créée par unité de temps par la réaction chimique :

$$\iiint_V r\,dV$$

(r : vitesse de réaction massique)

* quantité de matière s'accumulant dans le volume V.

$$\iiint_V \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) dV$$

équation de bilan : [ce qui rentre] + [ce qui se crée] = [ce qui s'accumule]

$$\iint_S D \text{ grad } C\,\vec{n}\,dS + \iiint_V r\,dV = \iiint_V \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) dV$$

$$\boxed{D\Delta C + r = \frac{\partial C}{\partial t}} \qquad 1(3)$$

ANNEXE II

RAPPELS SUR LES POLYNÔMES DE CHEBYSHEV |25|

* Définition :

L'expression générale d'un polynôme de Chebyshev d'ordre r est la suivante :

$$T_r(x) = \cos\,(r \cos^{-1}(x))$$

* Relation récurrente de génération des $T_r(x)$

Le polynôme T_{r+1} peut être obtenu à partir de T_r et T_{r-1} par la relation :

$$T_{r+1}(x) - 2x\, T_r(x) + T_{r-1}(x)$$

Si l'on pose $T_r(x) = \sum_{i=0}^{r} \tau_{ri}\, x^i$, les $\tau_{r+1,i}$ seront donnés par les relations récurrentes :

$$\begin{cases} \tau_{r+1,0} = -\,\tau_{r-1,0} \\ \tau_{r+1,i} = 2\tau_{r,i-1} - \tau_{r-1,i} \qquad \text{pour } i = 1,2\ldots.r-1 \\ \tau_{r+1,r} = 2\tau_{r,r-1} \\ \tau_{r+1,r+1} = 2\tau_{r,r} \end{cases}$$

Ces suites seront initialisées par les valeurs :

$$\begin{cases} \tau_{00} = 1 \\ \tau_{10} = 0 \qquad \tau_{11} = 1 \\ \tau_{20} = -\,1 \qquad \tau_{21} = 0 \qquad \tau_{22} = 2 \end{cases}$$

* Présentation matricielle

Soit le vecteur $\underline{T}$: $\underline{T}^T = [T_0(x)\ T_1(x)\ \ldots\ldots\ T_m(x)]$

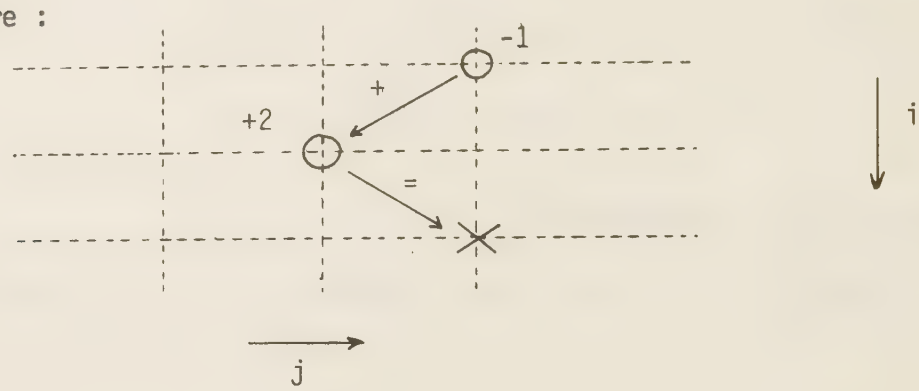
Soit la base $\underline{e}$: $\underline{e}^T = [1 \quad x \quad x^2\ \ldots\ldots\ldots\ x^m]$

On pourra écrire : $\underline{T} = A\,\underline{e}$

Dans cette expression, A est une matrice triangulaire inférieure construite de la façon suivante :

- initialisation de la 1ère colonne par les relations : $a_{2k+1,1} = (-1)^k$ et $a_{2k} = 0$
- mise en place de : $a_{22} = 1$ $\quad a_{32} = 0$ $\quad a_{33} = 2$
- calcul des a_{ij} avec : $a_{ij} = 2a_{i-1,j-1} - a_{i-2,j}$

c'est-à-dire :



$$\text{Soit } A = \begin{vmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & 0 & \\ -1 & 0 & 2 & & \\ 0 & -3 & 0 & 4 & \\ 1 & 0 & -8 & 0 & 8 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix}$$

* <u>Quelques polynômes...</u>

$T_0(x) = 1 \qquad T_1(x) = x \qquad T_2(x) = 2x^2 - 1$

$T_3(x) = 4x^3 - 3x \qquad T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$

* <u>Propriété caractéristique d'orthogonalité</u>

Définissons les grandeurs $\bar{x}_i = \cos \frac{(2i-1)\pi}{2(m+1)}$ pour $i = 1,2...(m+1)$

Nous avons la relation :

$$\sum_{i=1}^{m} T_k(\bar{x}_i)\, T_p(\bar{x}_i) = \begin{cases} 0 & \text{pour } k \neq p \\ \frac{m+1}{2} & \text{pour } k = p \neq 0 \\ m+1 & \text{pour } k = p = 0 \end{cases}$$

Cette expression peut prendre d'autres formes, mais nous l'avons utilisée ainsi dans le chapitre II.

ANNEXE III.A

RAPPELS SIMPLES SUR LES FONCTIONS DE GREEN |3| |16| |14|

Ces fonctions ayant de nombreuses possibilités et étant très utilisées, notre propos n'est pas de les présenter de façon exhaustive et rigoureuse ; nous renverrons pour cela aux ouvrages spécialisés, par exemple STAKGOLD |3| et FRIEDMANN |16|. Nous nous bornerons donc à en donner une notion simple, donc incomplète, et sans justification.

Considérons un opérateur différentiel linéaire du second ordre $\mathcal{M}_x$. Soit également l'équation différentielle :

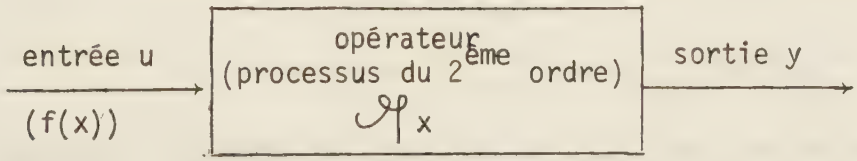
$$\mathcal{M}_x\, y = f(x) \qquad x \in [a,b] \tag{3A1}$$

où f(x) est une fonction continue sur [a,b], et où les conditions aux limites sont du type :

$$\begin{aligned} B_1(y) &= \alpha_{11}\, y(a) + \alpha_{12}\, y'(a) + \beta_{11}\, y(b) + \beta_{12}\, y'(b) = 0 \\ B_2(y) &= \alpha_{22}\, y(b) + \alpha_{21}\, y'(b) + \beta_{22}\, y(a) + \beta_{21}\, y'(a) = 0 \end{aligned} \tag{3A2}$$

(Le second membre nul n'est pas un obstacle à la généralité)

Le système (3A1) peut être représenté ainsi :



En appliquant les concepts de l'automatique, on peut utiliser comme entrée u une impulsion de Dirac δ, et la sortie, notée G, sera la réponse impulsionnelle du processus. Dans ce cas, la solution de (3A1) sera obtenue par convolution :

$$y(x) = \int_0^x G(x-\xi)\, f(\xi)\, d\xi$$

Nous introduisons ainsi intuitivement la notion de fonction de Green, G, sorte de réponse impulsionnelle de l'opérateur.

D'autre part, on démontre |3| que la solution du système (3A1) (3A2) existe et est unique, et que l'opérateur inverse $\mathcal{M}_x^{-1}$ existe.

On peut ainsi effectuer une démonstration rapide de la relation précédente :

$$\text{Soit } \mathcal{M}_x\, y = f(x) \quad \Rightarrow \quad y = \mathcal{M}^{-1} |f(x)| \tag{3A3}$$

Soit G solution de :

$$\mathcal{M}_x\, G = \delta(x-\xi) \tag{3A4}$$

où δ est l'impulsion de Dirac au point $(x = \xi)$, et $\xi \in [a,b]$. G sera donc fonction de x et de ξ. De plus, G sera assujetti à vérifier les conditions $B_1(G)=0$ et $B_2(G) = 0$.

La fonction δ est telle que :

$$< \delta(x),\ f > = \int_a^b \delta(x-\xi)\ f(\xi)\ d\xi = f(x) \tag{3A5}$$

(3A3) et (3A5) donnent :

$$y = \mathcal{M}_x^{-1} \left[\int_a^b \delta(x-\xi)\ f(\xi)\ d\xi\right]$$

$$y = \int_a^b \mathcal{M}_x^{-1}[\delta(x-\xi)\ f(\xi)]\ d\xi$$

$$y = \int_a^b \mathcal{M}_x^{-1}[\delta(x-\xi)]\ f(\xi)\ d\xi$$

or (3A4) $\Rightarrow$ $G(x,\xi) = \mathcal{M}_x^{-1}[\delta(x-\xi)]$

donc $$y = \int_a^b G(x,\xi)\ f(\xi)\ d\xi.$$

En fait, on montre que $G(x,\xi)$ se met sous la forme $G(x-\xi)$. Pratiquement, la résolution de l'équation (3A4) revient à résoudre $\mathcal{M}_x\, G = 0$; puis l'intervalle est séparé en deux parties, provenant du δ de Dirac en ξ :

$$\begin{cases} x > \xi \\ \text{et } x < \xi. \end{cases}$$

On définit ainsi deux fonctions de Green :

G_1 pour $x \in [a, \xi]$

et G_2 pour $x \in [\xi, b]$

Nous avons besoin de 4 relations pour calculer G_1 et G_2 :

$$B_1(G) = 0 \tag{1}$$

$$B_2(G) = 0 \tag{2}$$

Nous savons que G doit être continue en $x = \xi$:

$$G(x = \xi^-, \xi) = G(x = \xi^+, \xi), \text{ c'est-à-dire :}$$

$$G_1(\xi, \xi) = G_2(\xi, \xi) \tag{3}$$

Enfin, si l'on intègre la relation (3A4), on obtient :

$$\int_a^b \mathcal{L}_x G = \int_a^b \delta(x-\xi)\, dx \quad \text{ou} \quad \int_{\xi^-}^{\xi^+} \mathcal{L}_x G = \int_{\xi^-}^{\xi^+} \delta(x-\xi)\, dx = 1$$

Sachant que G est continue en $x = \xi$, nous avons :

$$\int_{\xi^-}^{\xi^+} \frac{dG}{dx}\, dx = 0, \int_{\xi^-}^{\xi^+} G\, dx = 0 \quad ; \text{ il reste donc le 1er terme :}$$

$$a_1 \int_{\xi^-}^{\xi^+} \frac{d^2G}{dx^2}\, dx = 1, \text{ c'est-à-dire la relation :}$$

$$\frac{1}{a_1} = \left(\frac{dG}{dx}\right)_{\xi^+} - \left(\frac{dG}{dx}\right)_{\xi^-} \tag{4}$$

que l'on peut généraliser au cas $a_1 = a_1(x)$.

La fonction de Green est ainsi complètement déterminée. Remarquons qu'elle présente l'intérêt d'inclure dans son expression analytique les conditions aux limites du problème, ce qui évite parfois d'avoir à utiliser des méthodes de tir.

ANNEXE III.B

CALCUL DES FONCTIONS DE GREEN

(Nous ne détaillerons que les calculs relatifs à la fonction G_n)

Pour déterminer les 4 constantes C_1^1, C_2^1, C_1^2, C_2^2 nous utilisons les 4 conditions aux limites (3134) (3135) (3136) (3137).

La relation (3134) permet d'écrire :

$$r_1\, C_1^1 + r_2\, C_2^1 = \frac{1}{\beta_L}\,(C_1^1 + C_2^1)$$

$$C_1^1\left(r_1 - \frac{1}{\beta_L}\right) = C_2^1\left(\frac{1}{\beta_L} - r_2\right) \text{ soit } C_1^1 = C_2^1\,\frac{\varepsilon - r_2}{r_1 - \varepsilon} \text{ avec } \varepsilon = \frac{1}{\beta_L}$$

La fonction G_n^1 s'écrit dès lors :

$$G_n^1 = C_2^1\left[\frac{\varepsilon - r_2}{r_1 - \varepsilon}\, e^{r_1 x} + e^{r_2 x}\right] \tag{31}$$

La relation (3135) permet d'écrire :

$$r_1\, C_1^2\, e^{r_1 \bar{x}} + r_2\, C_2^2\, e^{r_2 \bar{x}} = 0$$

$$C_1^2 = -\frac{r_2}{r_1}\, C_2^2\, e^{(r_2 - r_1)\bar{x}}$$

La fonction G_n^2 s'écrit dès lors :

$$G_n^2 = C_2^2\left[-\frac{r_2}{r_1}\, e^{(r_2 - r_1)\bar{x}}\, e^{r_1 x} + e^{r_2 x}\right] \tag{32}$$

La relation (3136) permet d'écrire :

$$C_2^1\left[\frac{\varepsilon - r_2}{r_1 - \varepsilon}\, e^{r_1 \xi} + e^{r_2 \xi}\right] = C_2^2\left[-\frac{r_2}{r_1}\, e^{(r_2 - r_1)\bar{x}}\, e^{r_1 \xi} + e^{r_2 \xi}\right]$$

$$C_2^1 = C_2^2\,\frac{-\dfrac{r_2}{r_1}\, e^{\bar{x}(r_2 - r_1)}\, e^{r_1 \xi} + e^{r_2 \xi}}{\dfrac{\varepsilon - r_2}{r_1 - \varepsilon}\, e^{r_1 \xi} + e^{r_2 \xi}} \tag{33}$$

La relation (3137) permet d'écrire :

$$C_2^2 \left[- r_2 \, e^{(r_2-r_1)\bar{x}} \, e^{r_1\xi} + r_2 \, e^{r_2\xi} \right] - C_2^1 \left[\frac{r_1(\varepsilon-r_2)}{(r_1-\varepsilon)} \, e^{r_1\xi} + r_2 \, e^{r_2\xi} \right] = \left(\frac{\beta_r}{\beta_L}\right)$$

En remplaçant C_2^1 par son expression (33), nous obtenons :

$$C_2^2\left[-r_2 e^{(r_2-r_1)\bar{x}} e^{r_1\xi}+r_2 e^{r_2\xi}\right]-C_2^2 \frac{\left[-\frac{r_2}{r_1} e^{\bar{x}(r_2-r_1)} e^{r_1\xi}+e^{r_2\xi}\right]\left[\frac{r_1(\varepsilon-r_2)}{(r_1-\varepsilon)} e^{r_1\xi}+r_2 e^{r_2\xi}\right]}{\left(\frac{\varepsilon-r_2}{r_1-\varepsilon}\right) e^{r_1\xi}+e^{r_2\xi}} = \frac{\beta_r}{\beta_L}$$

$$C_2^2 \frac{N}{D} = C_2^2 \frac{\left[-r_2 e^{(r_2-r_1)\bar{x}} e^{r_1\xi}+r_2 e^{r_2\xi}\right]\left(\left[\frac{\varepsilon-r_2}{r_1-\varepsilon}\right] e^{r_1\xi}+e^{r_2\xi}\right)-\left[-\frac{r_2}{r_1} e^{\bar{x}(r_2-r_1)} e^{r_1\xi}+e^{r_2\xi}\right]\left[\frac{r_1(\varepsilon-r_2)}{(r_1-\varepsilon)} e^{r_1\xi}+r_2 e^{r_2\xi}\right]}{\left(\left[\frac{\varepsilon-r_2}{r_1-\varepsilon}\right] e^{r_1\xi}+e^{r_2\xi}\right)}$$

Calculons séparément N et D :

$$N = - r_2 \frac{(\varepsilon-r_2)}{r_1-\varepsilon} e^{(r_2-r_1)\bar{x}} e^{2r_1\xi} - r_2 e^{(r_2-r_1)\bar{x}} e^{(r_1+r_2)\xi} + \frac{r_2(\varepsilon-r_2)}{r_1-\varepsilon} e^{(r_1+r_2)\xi} + r_2 e^{2r_2\xi}$$

$$+ \frac{r_2(\varepsilon-r_2)}{(r_1-\varepsilon)} e^{\bar{x}(r_2-r_1)} e^{2r_1\xi} + \frac{r_2^2}{r_1} e^{\bar{x}(r_2-r_1)} e^{(r_1+r_2)\xi} - r_2 e^{2r_2\xi} - \frac{r_1(\varepsilon-r_2)}{(r_1-\varepsilon)} e^{(r_1+r_2)\xi}$$

$$\Rightarrow N = (r_2-r_1) \, e^{(r_1+r_2)\xi} \left[\frac{\varepsilon-r_2}{r_1-\varepsilon} + e^{(r_2-r_1)\bar{x}} \cdot \frac{r_2}{r_1}\right]$$

Sachant que $r_1+r_2 = \frac{1}{\beta_L} = \varepsilon$:

$$N = (r_2-r_1) \, e^{\varepsilon\xi} \left[- \frac{r_1}{r_2} + \frac{r_2}{r_1} e^{(r_2-r_1)\bar{x}}\right]$$

$$D = - \frac{r_1}{r_2} e^{r_1\xi} + e^{r_2\xi}$$

d'où
$$C_2^2 = \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{D}{N} = \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{- \frac{r_1}{r_2} e^{-r_2\xi} + e^{-r_1\xi}}{(r_2-r_1) \left(\frac{r_2}{r_1} e^{(r_2-r_1)\bar{x}} - \frac{r_1}{r_2}\right)} \qquad (34)$$

(33) donne :

$$C_2^1 = \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{\left(- \frac{r_2}{r_1} e^{(r_2-r_1)\bar{x}} e^{r_1\xi} + e^{r_2\xi}\right) e^{-\varepsilon\xi}}{(r_2-r_1) \left(\frac{r_2}{r_1} e^{(r_2-r_1)\bar{x}} - \frac{r_1}{r_2}\right)} \qquad (35)$$

Les équations (34) et (35) ont en commun un terme indépendant de la variable ξ, que nous noterons :

$$\Omega_n = \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{1}{(r_2-r_1)\left(\frac{r_2}{r_1} e^{(r_2-r_1)\bar{x}} - \frac{r_1}{r_2}\right)}$$

Nous obtenons ainsi les relations (313A), (313B), (313C).

Les calculs sont rigoureusement semblables pour la fonction H_m, en remplaçant les β par des α et les r_i par des s_i.

Traitons séparément le cas particulier n = 1 ; en effet, $\lambda_1 = 0$.

Dans ce cas, nous avons $r_2 = 0$, et il n'est pas possible d'appliquer directement les relations trouvées dans le cas général.

$$\lambda_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad r_2 = 0, \quad r_1 = \frac{1}{\beta_L}$$

$$\Omega_n \sim \frac{\beta_r}{\beta_L} \frac{1}{\left(-\frac{1}{\beta_L}\right)\left(-\frac{r_1}{r_2}\right)} \sim \beta_r \beta_L r_2$$

$$G_1^1 \sim \beta_r \beta_L r_2 \left(e^{-\frac{1}{\beta_L}\xi}\right)\left(-\frac{r_1}{r_2} e^{r_1 x}\right) \sim -\frac{1}{\beta_L}(\beta_r\beta_L)\, e^{-\frac{1}{\beta_L}\xi}\, e^{\frac{1}{\beta_L}x}$$

$$G_1^1 \sim -\beta_r\, e^{\frac{1}{\beta_L}(x-\xi)}$$

$$G_1^2 \sim \beta_r \beta_L r_2 \left[\left(-\frac{r_1}{r_2}\right) + e^{-\xi\frac{1}{\beta_L}}\right] \sim -\beta_r$$

d'où

$$\begin{cases} G_1^1 = -\beta_r\, e^{\frac{1}{\beta_L}(x-\xi)} \\ G_2^2 = -\beta_r \end{cases}$$

On retrouve aisément ces résultats en constatant que G_1 est solution de l'équation :

$$\frac{\beta_L}{\beta_r}\ddot{G}_1 - \frac{1}{\beta_r}\dot{G}_1 = 0,$$

avec les quatre conditions aux limites habituelles.

ANNEXE III.C

PROCEDURE PRATIQUE DE DETERMINATION DES VALEURS PROPRES

Les spectres des opérateurs intégraux $K(\rho,n)$ et $L(\rho,m)$ sont respectivement les suites de λ_i ... et ν_j solutions des équations :

$$\begin{cases} \lambda\, J_1(\lambda) = 0 & (3C1) \\ -\nu\, J_1(\nu) + Bi\, J_o(\nu) = 0 & (3C2) \end{cases}$$

Le cas de l'équation (3C1) est relativement simple et les valeurs de λ qui annulent cette expression sont :

$\lambda_1 = 0.$

$\lambda_2 = 3.83$

$\lambda_3 = 7.01$

$\lambda_4 = 10.17$

$\lambda_5 = 13.32$

.....

$\lambda_i - \lambda(i-1) \longrightarrow \pi$ pour $i \to +\infty$

Pratiquement, nous donnons les valeurs λ_1, λ_2, λ_3, λ_4, λ_5 et nous affinons autour de ces valeurs. Les suivantes sont obtenues par une simple translation de π.

L'équation (3C2) s'écrit :

$$\frac{x}{Bi} = \frac{J_o(x)}{J_1(x)}$$

Posons $y = \dfrac{J_o(x)}{J_1(x)}$; y s'annule pour les racines de $J_o(x)$ soit ε_1, ε_2,... et devient non définie pour les racines de $J_1(x)$, soit λ_1, λ_2, ...

$$\dot{y} = \frac{\dot{J}_o J_1 - \dot{J}_1 J_o}{J_1^2} = \frac{-J_1^2 - J_o^2 + \frac{1}{x} J_o J_1}{J_1^2} = -1 - y^2 + \frac{1}{x} y < o \quad \text{si } y < o$$

Démontrons que $\dot{y} < 0$ - dans le cas où $y > o$; pour cela :

a) Considérons $x \geq 1 \Rightarrow \frac{y}{x} \leq y \Rightarrow \dot{y} \leq -1 - y^2 + y < 0$ puisque y est réel et $> o$.

b) Considérons $x < 1$, alors $J_o(x) \searrow$, $J_1(x) \nearrow$ et par suite $y \searrow$.

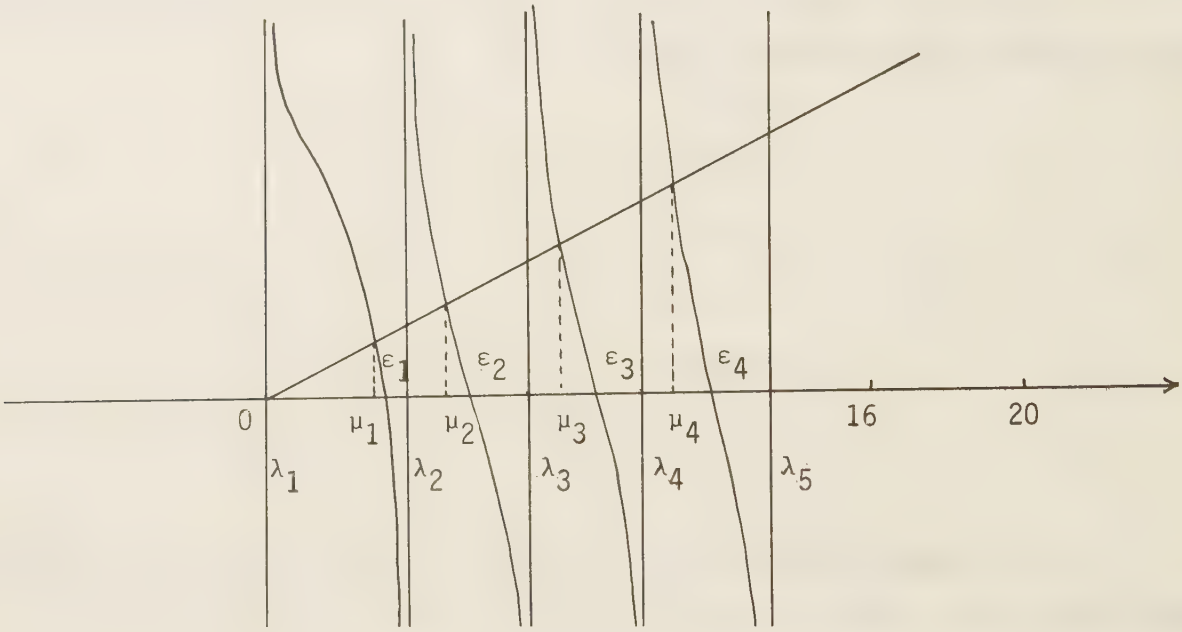
Par ailleurs, les approximations asymptotiques de $J_o(x)$ et $J_1(x)$ sont :

$$J_o(x) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$J_1(x) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{3\pi}{4}\right)$$

$$\Rightarrow \qquad y \simeq \operatorname{cotg}\left(x - \frac{\pi}{4}\right)$$

Ceci est utilisable de manière satisfaisante pour $x > 15$. La forme de la fonction y est donc :



Ainsi, les valeurs propres μ_i sont localisées par la relation $\mu_i \;]\lambda_i, \lambda_{i+1}[$.

Leur détermination précise fait l'objet d'une recherche type "section dorée".

ANNEXE IV

ASPECT NUMERIQUE DU PROBLEME D'OPTIMISATION DES SYSTEMES DYNAMIQUES PAR LE PRINCIPE DU MAXIMUM |4| |24|

IV.I - LE PRINCIPE DU MAXIMUM - RAPPELS SIMPLES SUR LA FORMULATION |4|

Soit un système physique dont le modèle de représentation est :

4(1) $$\begin{cases} \overset{\circ}{\underline{X}} = \underline{f}(\underline{X}, \underline{U}) \\ \underline{X}(0) = \underline{X0} \end{cases} \iff \begin{cases} \dfrac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \ldots x_i \ldots x_n, u_1 \ldots u_j, u_p) \\ x_i(o) = x_o \qquad i = 1,n \end{cases}$$

- la variable indépendante t peut être le temps (réacteur fermé en régime transitoire) ou une coordonnée d'espace (réacteur continu en régime permanent)
- les x_i ont parfois une signification physique (concentration - température) ou parfois pas (combinaisons linéaires des dérivées successives d'une grandeur physique)
- la commande $\underline{U}$ (température ou pression dans un réacteur) peut-être soumise à des contraintes :

4(2) $$\Psi_i(\underline{U}) = \Psi_i\ (U_1, U_2, \ldots U_j \ldots U_p) \leq 0 \qquad \forall\ i = 1, n$$

- on se propose d'optimiser (max ou min) un critère de la forme :

4(3) $$\Phi(\underline{U}) = \underline{C}^T\ \underline{X}(T) \quad \text{ou} \quad \Phi(U_1, \ldots U_p) = \sum_{i=1}^{n} C_i\ x_i(T)$$

Le critère ainsi formulé ne dépend donc que du vecteur d'état dans la configuration finale du processus.

- on pose un Hamiltonien :

4(4) $$(\underline{Z}, \underline{U}, \underline{X}) = \underline{Z}^T\ \underline{f} = \sum_{i=1}^{n} z_i\ f_i(\underline{X}, \underline{U})$$

avec :

4(5) $$\begin{cases} \dfrac{dz_i}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{j=1}^{n} z_j\ \dfrac{\partial f_j(\underline{X}, \underline{U})}{\partial x_i} \qquad \forall\ i = 1, \ldots n \\ z_i(T) = C_i \end{cases}$$

- une condition nécessaire d'optimalité pour $\Phi(\underline{U})$ est :

4(6) $$\frac{\partial H}{\partial \underline{U}} = \underline{0} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial H}{\partial u_i} = 0 \qquad \forall\, i = 1, p \quad , \text{ pour } \underline{U} = \underline{U}^*$$

Enoncé du principe : Soit $\underline{U}(t), t \in [0, T]$, une fonction vectorielle continue par morceaux satisfaisant aux contraintes 4(2). Une condition nécessaire pour que $\Phi(\underline{U})$ donné par 4(3) soit maximale (ou minimale) pour un système régi par le modèle mathématique 4(1) est qu'il existe une fonction vectorielle $\underline{Z}(t)$ non nulle satisfaisant les relations 4(5) et que la fonction vectorielle $\underline{U}(t)$ soit choisie de telle sorte que $(\underline{Z}, \underline{U}, \underline{X})$ soit maximum (ou minimum) pour tout $t \in [0, T]$. De plus, le maximum (ou minimum) de H est constant quel que soit t.

Remarque : L'application du principe du maximum se ramène à l'intégration d'un système de 2n équations différentielles du 1er ordre avec valeurs limites aux deux bouts.

$$\mathring{\underline{X}} = \underline{f}(\underline{X}, \underline{U}) \qquad \underline{X}(t_0) = \underline{X0}$$

$$\mathring{\underline{Z}} = g(\underline{X}, \underline{U}, \underline{Z}) \qquad \underline{Z}(T) = \underline{ZT}$$

$\underline{U}$ étant tel que $\frac{\partial H}{\partial \underline{U}} = \underline{0}$ ou $H = \underline{Z}^T \underline{f}$

Soit encore :

$$H = \underline{Z}^T \underline{f}(\underline{X}, \underline{U})$$

4(7) $$\mathring{\underline{X}} = \frac{\partial H}{\partial \underline{Z}} \quad \text{et} \quad \mathring{\underline{Z}} = -\frac{\partial H}{\partial \underline{X}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial H}{\partial \underline{U}} = \underline{0} \text{ à l'optimum}$$

$$\underline{X}(t_0) = \underline{X0} \quad \text{et} \quad \underline{Z}(T) = \underline{ZT}$$

Mis à part quelques exemples simples, 4(7) ne possède pas de solution analytique et nous proposons ici une analyse des principales méthodes de traitement numérique.

IV.II - METHODE DE QUASI-LINEARISATION DE BELLMAN

- Admettons que le système algébrique $\frac{\partial H}{\partial \underline{U}} = \underline{0}$ soit résoluble en $\underline{U}$. Dès lors, l'optimisation se résume à l'intégration d'un système de la forme :

4(8) $$\begin{cases} \mathring{\underline{X}} = \underline{F}(\underline{X}, \underline{Z}) \\ \mathring{\underline{Z}} = \underline{G}(\underline{X}, \underline{Z}) \\ \underline{X}(t_0) = \underline{X0} \\ \underline{Z}(T) = \underline{ZT} \end{cases}$$

IV.II.1 - Méthode de tir

Cette méthode consiste à choisir $\underline{Z}(t_0)$ et à intégrer dans le sens direct le système 4(8). Les conditions finales $\underline{Z}(T)$ n'étant pas satisfaites, on reprend l'intégration en corrigeant $\underline{Z}(t_0)$ par une méthode de P.N.L., en utilisant l'écart $\underline{Z}(T) - \underline{ZT}$.

IV.II.2 - Quasi-linéarisation

Si le système 4(8) était linéaire, nous pourrions nous ramener à l'intégration d'un système d'équations de plus grande dimension avec conditions initiales (voir démonstration plus loin) ; nous cherchons donc à nous ramener à ce cas. Soit $\underline{X}^P(t)$ et $\underline{Z}^P(t)$, $t \in [t_0, T]$ une approximation de la solution à l'itération p. L'itération (p+1) donnera une solution améliorée $\underline{X}^{p+1}$ et $\underline{Z}^{p+1}$.

$$\underline{F}(\underline{X}^{p+1}, \underline{Z}^{p+1}) \simeq \underline{F}(\underline{X}^p, \underline{Z}^p) + \underline{F}_{\underline{X}}(\underline{X}^{p+1} - \underline{X}^p) + \underline{F}_{\underline{Z}}(\underline{Z}^{p+1} - \underline{Z}^p)$$

$$\underline{G}(\underline{X}^{p+1}, \underline{Z}^{p+1}) \simeq \underline{G}(\underline{X}^p, \underline{Z}^p) + \underline{G}_{\underline{X}}(\underline{X}^{p+1} - \underline{X}^p) + \underline{G}_{\underline{Z}}(\underline{Z}^{p+1} - \underline{Z}^p)$$

soit encore :

$$\begin{cases} \overset{\circ}{\underline{X}}{}^{p+1} = \underline{F}_{\underline{X}}\, \underline{X}^{p+1} + \underline{F}_{\underline{Z}}\, \underline{Z}^{p+1} + \left[\underline{F}(\underline{X}^p, \underline{Z}^p) - \underline{F}_{\underline{X}}\, \underline{X}^p - \underline{F}_{\underline{Z}}\, \underline{Z}^p\right] \\ \overset{\circ}{\underline{Z}}{}^{p+1} = \underline{G}_{\underline{X}}\, \underline{X}^{p+1} + \underline{G}_{\underline{Z}}\, \underline{Z}^{p+1} + \left[\underline{G}(\underline{X}^p, \underline{Z}^p) - \underline{G}_{\underline{X}}\, \underline{X}^p - \underline{G}_{\underline{Z}}\, \underline{Z}^p\right] \end{cases}$$

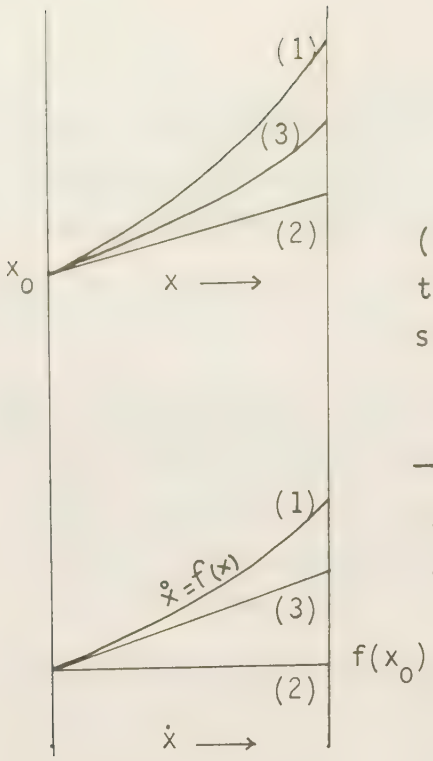
Ce système peut s'écrire :

$$4(9) \qquad \begin{cases} \overset{\circ}{\underline{X}}{}^{p+1} = A\, \underline{X}^{p+1} + B\, \underline{Z}^{p+1} + \underline{C} & \underline{X}(t_0) = \underline{XO} \\ \overset{\circ}{\underline{Z}}{}^{p+1} = A'\underline{X}^{p+1} + B'\underline{Z}^{p+1} + \underline{C}' & \underline{Z}(T_0) = \underline{ZT} \end{cases}$$

avec par exemple :

$$A = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots\cdots\cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ & & \\ \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1} & & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{vmatrix}$$

Remarque : Pour illustrer la quasi-linéarisation, prenons un exemple simple :



$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = f(x) \\ x(o) = xo, \ f(x) \text{ étant non linéaire} \end{cases}$$

(1), (2), (3) représentent respectivement la solution exacte, la méthode d'Euler et la quasilinéarisation.

	solution exacte	méthode d'Euler	méthode de quasilinéarisation
fonction intégrée	$f(x)$	$f(x_o)$	$\left[f(x_o) - \left.\dfrac{\partial f}{\partial x}\right\|_{x_o}^{x_o}\right] + \left(\dfrac{\partial f}{\partial x_o}\right)x$

IV.II.3 - <u>Résolution du système algébrique linéaire 4(9) à valeurs limites aux 2 bouts</u>

<u>Remarque 1</u> : Le système 4(9) pourrait s'écrire sous forme condensée :

$$\mathring{\underline{X}} = A\underline{X} + \underline{B}$$

Montrons que la solution générale de ce système peut se mettre sous forme d'une combinaison linéaire d'un système identique avec second membre et de n systèmes homogènes :

$$\begin{cases} \mathring{\underline{Y}} = A\underline{X} + \underline{B} \\ \mathring{\underline{Z}}_k = A\underline{Z}_k \quad \text{avec} \quad k = 1, N \end{cases}$$

Prenons une combinaison linéaire :

$$\underline{X} = \alpha\, \underline{Y} + \sum_{k=1}^{N} \beta_k\, \underline{Z}_k \qquad (\alpha \text{ et } \beta_k \text{ scalaires})$$

$$\mathring{\underline{X}} = \alpha\, \mathring{\underline{Y}} + \sum_{k=1}^{N} \beta_k\, \mathring{\underline{Z}}_k = \alpha\, A\, \underline{Y} + \alpha\, B + \sum_{k=1}^{N} \beta_k\, A\, \underline{Z}_k$$

nécessairement $\alpha = 1$, d'où :

$$\mathring{\underline{X}} = A\, \underline{Y} + \sum_{k=1}^{N} \beta_k\, A\, \underline{Z}_k + \underline{B} = A\left[\underline{Y} + \sum_{k=1}^{N} \beta_k\, \underline{Z}_k\right] + B = A\, \underline{X} + \underline{B}$$

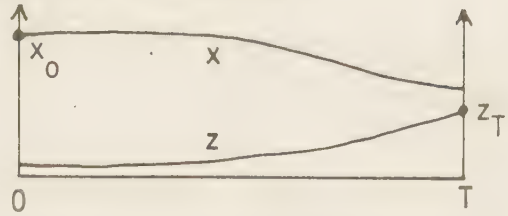
Ainsi, la combinaison linéaire est nécessairement de la forme :

$$\underline{X} = \underline{Y} + \sum^{N} \beta_k\, \underline{Z}_k \qquad (N \text{ pouvant valoir } 1, 2 \ldots\ldots \infty)$$

Remarque 2 : Expliquons sur un exemple simple à 2 dimensions :

$$\begin{cases} \mathring{x} = ax + bz + c \\ \mathring{z} = a'x + b'z + c' \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(o) = x_o \\ z(T) = zT \end{cases}$$



on écrit 2 systèmes :

$$\begin{cases} \mathring{u} = au + bw + c \\ \mathring{w} = a'u + b'w + c' \\ u(o) = x_o \\ w_o = \forall \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathring{g} = ag + bh \\ \mathring{h} = a'g + b'h \\ g(o) = 0 \\ h(o) = \forall \end{cases}$$

On peut intégrer ces 2 systèmes puisque ce sont des systèmes différentiels à valeurs initiales ; on obtient alors g(T) et h(T). Nous prenons ensuite pour x et z :

$$\begin{cases} x(t) = u(t) + \dfrac{zT - w(T)}{h(T)}\, g(t) \\ z(t) = w(t) + \dfrac{zT - w(T)}{h(T)}\, h(t) \end{cases}$$

nous pouvons vérifier aisément que les conditions $x(t_o) = x_o$ et $z(T) = zT$ sont bien respectées.

Méthode dans le cas général :

Le système4(9) s'écrit, plus simplement :

$$4(10) \qquad \begin{cases} \mathring{\underline{X}} = A\underline{X} + B\underline{Z} + \underline{C} & \underline{X}(t_o) = \underline{X}_o \\ \mathring{\underline{Z}} = A'\underline{X} + B'\underline{Z} + C' & \underline{Z}(T) = \underline{Z}T_1 \end{cases} \qquad \text{dimension } 2N$$

au lieu de résoudre 4(10) nous résolvons N+1 systèmes, c'est-à-dire 2N(N+1) équations :

$$4(11) \qquad \begin{cases} \mathring{\underline{U}} = A\underline{U} + B\underline{W} + \underline{C} & \underline{U}(t_o) = \underline{X}_o \\ \mathring{\underline{W}} = A'\underline{U} + B'\underline{W} + C' & \underline{W}(t_o) = \forall \end{cases}$$

$$4(12) \qquad \begin{cases} \mathring{\underline{G}}_k = A\underline{G}_k + B\underline{H}_k & \underline{G}_k(t_o) = \underline{0} \\ \mathring{\underline{H}}_k = A'\underline{G}_k + B'\underline{H}_k & \underline{H}_k(t_o) = \forall \end{cases} \qquad \text{pour } k = 1, N$$

Les (N+1) systèmes 4(11) et (12) à valeurs initiales connues peuvent être intégrés et l'on obtient alors $\underline{G}(T)$ et $\underline{H}_k(T)$. Nous choisirons pour combinaisons linéaires :

$$4(13) \qquad \begin{cases} \underline{X}(t) = \underline{U}(t) + \sum_{k=1}^{N} \alpha_k \underline{G}_k(t) \\ \underline{Z}(t) = \underline{W}(t) + \sum_{k=1}^{N} \alpha_k \underline{H}_k(t) \end{cases}$$

Les N coefficients α_k de la combinaison linéaire sont obtenus en résolvant le système de Cramer :

$$4(14) \qquad \sum_{k=1}^{N} \alpha_k \underline{H}_k(T) = \underline{ZT} - \underline{W}(T)$$

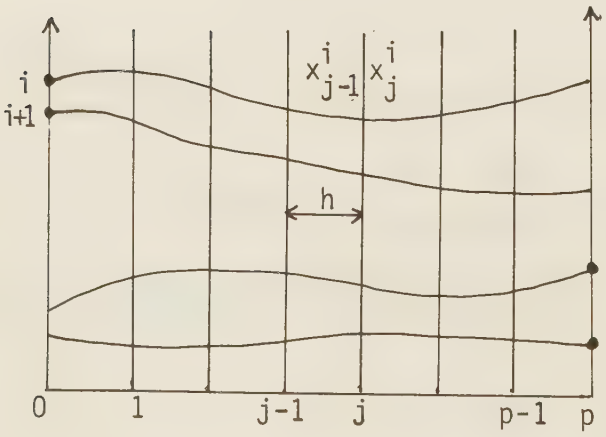
Si le déterminant associé à 4(14) était nul, il faudrait choisir d'autres valeurs initiales pour 4(12).

IV.III - METHODE DES DIFFERENCES FINIES

Cette méthode consiste à transformer les équations différentielles 4(8) en équations récurrentes.

$$4(8) \qquad \begin{cases} \overset{\circ}{\underline{X}} = \underline{F}(\underline{X}, \underline{Z}) \\ \overset{\circ}{\underline{Z}} = \underline{G}(\underline{X}, \underline{Z}) \\ \underline{X}(t_o) = \underline{X}_o \\ \underline{Z}(T) = \underline{ZT} \end{cases}$$

$$4(15) \qquad \begin{cases} x_j^i - x_{j-1}^i = h\, f_i(\underline{X}, \underline{Z}) \begin{cases} \forall\, j = 1, P \\ \forall\, i = 1, N \end{cases} \\ z_d^i = z_{j-1}^i = h\, f_i(\underline{X}, \underline{Z}) \begin{cases} \forall\, j = P, 1 \\ \forall\, i = 1, N \end{cases} \\ x_o^i = x_i(o) \\ z_p^i = z^i(T) \end{cases}$$



Le système 4(15) est un système de 2PN équations non linéaires à 2PN inconnues. Nous proposons 2 solutions pour le résoudre :

IV.III.1 - Méthode de Newton Raphson

4(15) peut s'écrire :

4(16) $$\underline{\mathcal{H}}(\underline{Y}) = \underline{0}$$

La procédure de résolution est itérative. Soit $\underline{Y}^k$ la solution à la $k^{ème}$ itération, 4(16) n'est pas satisfaite et il y a un résidu : $\underline{\mathcal{R}}_k$

$$\underline{\mathcal{H}}(\underline{Y}_k) = \underline{\mathcal{R}}_k$$

$\underline{\mathcal{R}}_k$ est fonction de $\underline{Y}_k$, par exemple :

$$d\underline{\mathcal{R}}_k^i = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial y_k^i}(\underline{Y}_k)\, dy_k^i$$

Soit encore :

$$\underline{\Delta\mathcal{R}}_k = \left\{\underline{\mathcal{H}}_{\underline{Y}_k}\right\} \underline{\Delta}\, Y_k$$

On cherche à annuler le résidu ; or, après l'itération k, il vaut $\underline{\mathcal{R}}_k$; par suite, on prendra $\underline{\Delta\mathcal{R}}_k = -\underline{\mathcal{R}}_k$ et comme $\underline{\Delta}\, Y_k = \underline{Y}_{k+1} - \underline{Y}_k$, on obtient :

$$\underline{Y}_{k+1} = \underline{Y}_k - \left\{\underline{\mathcal{H}}_{\underline{Y}_k}\right\}^{-1} \underline{\mathcal{R}}_k$$

Cette méthode itérative suppose :

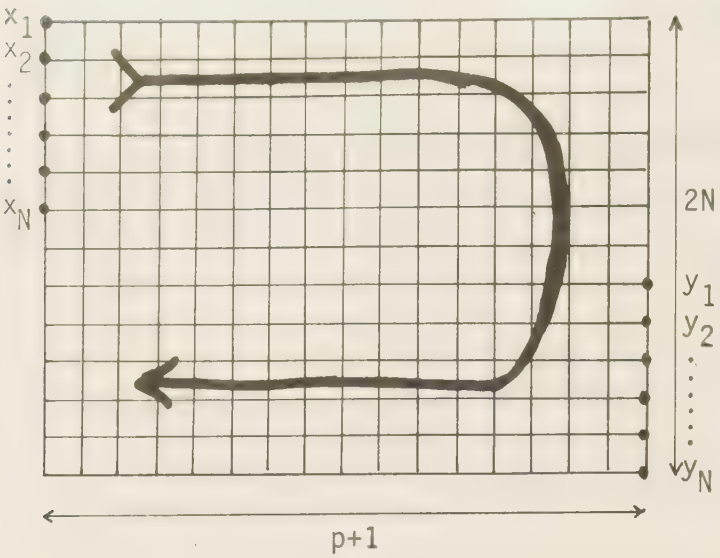
1 - que $\underline{\mathcal{H}}_{\underline{Y}_k}$ soit calculable, si possible analytiquement

2 - que la procédure converge, ce qui n'est pas assuré dans le cas général

3 - elle suppose un pas h suffisamment fin pour que l'approximation des équations différentielles en équations récurrentes soit acceptable

4 - elle nécessite l'inversion répétée de $\underline{\mathcal{H}}_{\underline{Y}_k}$ qui est une matrice de grande dimension non pleine.

IV.III.2 - Méthode de relaxation



- Cette méthode facile à programmer consiste à travailler sur une matrice 2N × (P+1) soit A(I,1) où I = 1,(2N)
  J = 1,(P+1)

- Au départ, on impose :

  $A(I,1) = x_j(0)$ pour I = 1, N
  $A(I,P+1) = x_j(T)$ pour I=N+1,2N

- On remplit le reste de la matrice par des valeurs quelconques et on parcourt la matrice toujours dans le même sens ( ). En chaque point de la maille, on détermine un résidu.

$$R(I,J) = A(I,J) - \left[A(I,J-1) + f\left[A(I,J-1) \text{ pour } I = 1,2N\right]\right]$$

et on effectue la correction :

$$A(I,J) = A(I,J) - \alpha\, R(I,J)$$

(α est le coefficient de relaxation). On arrête la procédure lorsque :

$$\max/I,J\ \left[R(I,J)\right] < \varepsilon \text{ donné}$$

N.B. : Cette méthode simple s'applique aussi aux équations aux dérivées partielles.

Enfin, signalons la méthode de Riccatti, dans le cas des systèmes linéaires, et les procédures utilisant le calcul hybride (22) (26).

BIBLIOGRAPHIE

|1| - KOSHLYAKOV, SMIRNOV, GLINER -
Differential Equations of Mathematical Physics
(N.H.P.C. 1964)

|2| - GOUDET -
Les fonctions de Bessel et leurs applications en physique
(Masson 1965)

|3| - STAKGOLD -
Boundary Value Problems of Mathematical Physics (Vol. I)
Macmillan 1968

|4| - FAN -
The continuous Maximum Principle. Wiley 1966.

|5| - LEITMANN -
An Introduction to optimal Control
(Mc Graw-Hill 1966)

|6| - GOULD -
Chemical Process Control : Theory and Application.
Addison Wesley 1969.

|7| - DENTE, BIARDI, RANZI -
Sviluppo di un modello Matematico per reattori chimici tubolari
con importanti fenomeni diffusivi assiali e radiali
(Ing. Chim. Ital. Vol. 6 N°6 Juin 1970)

|8| - CADZOW-MARTENS -
Discrete Time and Computer Control Systems. Prentice Hall 1970.

|9| - ARIS -
The Optimal Design of Chemical Reactors.
(Academic Press 1961)

|10| - LE LETTY, LE POURHIET, GROS, ENJALBERT -
Modèle bidimensionnel de réacteur catalytique à lit fixe
Institut de Génie Chimique - Toulouse 1972

|11| - ZONE - CHANG -
A successive approximation method for non linear distributed parameter
control system
(International Journal of Control - Vol. 15 n°2 Fév. 1972).

|12| - ESPIAU - LAURGEAU -
Simulation et commande de réacteurs catalytiques représentés par des
modèles aux dérivées partielles avec commande frontière.
Colloque Franco-Soviétique sur la catalyse - Novosibirsk, mars 1975.

|13| - SMITH -
Chemical Engineering Kinetics (2ème édition)
Mc Graw Hill, 1970.

|14| - HIMMELBLAU - BISCHOFF -
Process Analysis and Simulation : Deterministic Systems.
Wiley : 1968.

|15| - COMITI - LAURGEAU -
Communication K3.7
Effect of axial dispersion coefficient and density variations on the optimal temperature progression for a first order reversible reaction.
CHISA'75, 5th International Congress of Chemical Engineering Chemical Equipment Design and Automation (Prague 1975).

|16| - FRIEDMAN -
Principes and Techniques of applied Mathematics .
Wiley - 1966 - 8e édition.

|17| - SERANE -
Mathématiques de la Physique Appliquée (DUNOD).

|18| - CHANG et BANKOFF -
Optimal Control of Tubular Reactor
AICHE Journal, Mai 1969.

|19| - PETERSEN -
Chemical Reaction Analysis
Prentice Hall 1965.

|20| - ZASMOLIN, IABLONSKI, BESKOV -
Académie des Sciences de l'U.R.S.S. - Institut de Catalyse - Novosibirsk. Publication de 1968, Tome II, n°2.

|21| - BIKOV, IABLONSKI, SLINKO -
Académie des Sciences de l'U.R.S.S. - Institut de Catalyse - Novosibirsk. Publication de 1973, Tome VII, n°5.

|22| - BURGER, JARNY -
Hybrid simulation of a distributed parameters system with receding horizon control.
AICA International Symposium, USA, 1975.

|23| - PATOUILLET, GARRIC, BACHELIER -
Rapports internes sur les expériences réalisées sur le pilote industriel de reforming (Donges, 1974).

|24| - BEVERIDGE, SCHECHTER -
Optimization : Theory and Practice.
Mc Graw Hill, 1970.

|25| - KUO -
Computer Application of Numerical Methods.
Addison Wesley 1972.

|26| - OGER -
Thèse de 3ème cycle.
Simulation numérique et hybride de problèmes de commande dans le cas de systèmes régis par des équations aux dérivées partielles (E.N.S.M. - Nantes - 1974).

|27| - LAPIDUS -
Digital Computation for Chemical Engineers.
Mac Graw Hill, 1962.

|28| - DANCKWERTS
Chemical Engineering Science, 1953, 1.1.

|29| - VINCENT
Thèse de Docteur-Ingénieur
"Optimisation et Contrôle d'un réacteur adiabatique à lit multiple"
Nancy (Janvier 1971)

|30| - SLINKO
Exposé de clôture - Congrès Franco-Soviétique sur la Catalyse.
Novosibirsk (Mars 1975).

... COMPARAISON ENTRE RESULTATS THEORIQUES ET EXPERIMENTAUX

dessin d'André LEVAVASSEUR

extrait de la revue ANDES (mars 1975)

Atelier de reproduction de l'E.N.S.M.